

**Universidad  
Autónoma  
Metropolitana**



Casa abierta al tiempo **Azcapotzalco**

---

## **Optimización con Multi-Arranque Estocástico para la Síntesis de Sistemas de Tratamiento Distribuido de Efluentes Industriales**

Tesis que para obtener el grado de:

**Maestra en Ingeniería de Procesos**

Presenta:

**I.Q. Rocío Gallegos Delgado**

Director de Tesis

**Dr. Juan Manuel Zamora Mata**

Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica

UAM-Iztapalapa

Ciudad de México, Diciembre de 2017

# **Optimización con Multi-Arranque Estocástico para la Síntesis de Sistemas de Tratamiento Distribuido de Efluentes Industriales**

Rocío Gallegos Delgado

Tesis de Maestría en Ingeniería de Procesos

Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

A mi familia. Gracias a todos por su afecto, su apoyo y sus enseñanzas a lo largo de las distintas etapas de mi vida.

« *Cum Deus calculat, fit mundus* »

(*Cuando Dios calcula, el mundo se hace*)

—Leibniz, c. 1700

## Resumen

Las industrias de proceso generan grandes volúmenes de efluentes, los cuales deben recibir tratamiento antes de descargarse en cloacas o cuerpos de agua para cumplir con los límites ambientales permitidos para diversos contaminantes, establecidos por las legislaciones vigentes. Los sistemas de tratamiento de efluentes suelen ser costosos y pueden afectar la rentabilidad de una industria, por lo que se busca diseñar sistemas que cumplan con las especificaciones de descarga al menor costo posible.

En un sistema de tratamiento distribuido, las corrientes efluentes pueden o no tratarse, de manera total o parcial según se requiera, en uno o más procesos de tratamiento con distintas tasas de remoción para uno o varios contaminantes y se mezclan con otras corrientes si es conveniente. El problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes, abordado en este trabajo, consiste en obtener la topología (arreglo y conectividad de los procesos de tratamiento) y las condiciones de operación que minimizan el costo total anual, CTA, del sistema. Uno de los enfoques para abordar este problema es la optimización de una superestructura de red, que engloba todos los posibles arreglos de los procesos de tratamiento y la conectividad que estos pueden tener entre sí y con las corrientes efluentes. Para formular matemáticamente esta superestructura se utilizan modelos de Programación No Lineal, PNL, o Programación No Lineal Entera Mixta, PNL-EM. Obtener una solución óptima global a este problema es muy complejo, pues las no convexidades presentes en los modelos causan dificultades a los algoritmos de solución y generalmente existe más de una solución óptima local. Los algoritmos de PNL generan un óptimo local, que probablemente no es el óptimo global del problema y además puede ser una solución pobre, la solución obtenida tiene una fuerte dependencia con el punto de arranque del proceso de solución.

En este trabajo se propone un modelo de PNL para una superestructura de red, el cual se denominó modelo PNL-R, y a diferencia de algunos modelos de la literatura considera corrientes de recirculación y reciclo en la estructura de la red, éstas pueden ser útiles para disminuir costos o lograr factibilidad en algunos casos. Para resolver el modelo se propone un algoritmo iterativo de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases. En la primera fase, la fase global, se genera de manera aleatoria un punto de arranque, en la segunda fase, la fase local, un resolvidor de PNL obtiene una solución óptima local a partir del punto generado en la fase global si esto es factible. Repitiendo el algoritmo se generan múltiples puntos de arranque, con lo cual se busca una amplia exploración de la región factible y con la fase local se consigue que cada solución obtenida sea la mejor en la vecindad del punto de arranque. De las soluciones obtenidas se elige la de menor costo y si se realizan iteraciones suficientes pueden obtenerse soluciones de alta calidad e incluso soluciones óptimas globales. El modelo y el algoritmo se aplicaron a 17 problemas de la literatura, de diferentes autores y con distintas características, con lo cual se validó el modelo y se probó la efectividad de la metodología de solución. Se reprodujo la mejor solución reportada en la literatura para todos los problemas abordados en tiempos de cómputo razonables, para diez de estas soluciones otros autores han probado que son óptimos globales por métodos deterministas y para dos de los problemas abordados se obtienen soluciones de menor costo que las reportadas en la literatura. Se concluye que el método es muy efectivo para abordar este tipo de problemas y tiene potencial para aplicarse en problemas incluso más complejos.

## Abstract

Process industries generate large volumes of wastewater, which must be treated before their discharge into public sewers or waterbodies to meet environmental limits for diverse pollutants, which are established by current laws. Wastewater treatment systems use to be expensive and can influence profitability for an industry, thus it is required to design systems that fulfill discharge specifications at minimum possible costs.

In a distributed wastewater treatment system, wastewater streams may be treated or not, partially or entirely, depending on what is required, in one or more treatment processes with different removal ratios for one or several contaminants and they are mixed with other streams if this is convenient. The synthesis of distributed wastewater treatment systems problem, addressed in this work, consists in finding topology (arrangement and connectivity between treatment processes) and operating conditions that minimize total annual cost, TAC, for a system. One approach used to address this problem is the optimization of a network superstructure, which embeds all possible sequences of the treatment processes and the connectivity they may have among them and with effluent streams. Non Linear Programming, NLP, and Mixed Integer Non Linear Programming, MINLP, models are used to formulate mathematically this superstructure. Find a global optimum for this problem is very complex, since non-convexities in models cause difficulties to solution algorithms and there is often more than one local optima. NLP algorithms obtain a local optima, which probably is not the global optima of the problem and could also be a poor solution, the obtained solution is strongly dependent with the starting point of the solution process.

In this work, a NLP model for a network superstructure is proposed, which has been named model PNL-R, and unlike some other models in literature it considers recycle and recirculation streams in the network structure, these streams might be useful to decrease costs or achieve feasibility in some cases. A two phase stochastic multi-start optimization algorithm is proposed to solve this model. In the first phase, the global phase, a starting point is randomly generated, in the second phase, the local phase, a NLP solver obtains a local optimal solution initializing from the point generated in the global phase when this is feasible. Repeating this algorithm, multiple starting points are generated, wherewith a wide exploration of the feasible region is performed, and the local phase assures that every solution obtained is the best in the neighborhood of the starting point. Among the obtained solutions, the one with the minimum cost is chosen and, if enough iterations are performed, high quality solutions or even global optima can be obtained. The model and algorithm were applied to 17 literature problems, from different authors and with different features, this way the model is validated and the effectiveness of the solution method is proven. For every addressed problem, the best solution reported in literature was obtained within reasonable computational time, for ten of these solutions other authors have proven global optimality by deterministic methods and for two of the addressed problems less expensive solutions than those reported in literature were obtained. It is concluded that the method is very effective to address this kind of problems and it has potential to be applied to even more complex problems.

## **Agradecimientos**

Agradezco profundamente a mi asesor de tesis, el Dr. Juan Manuel Zamora Mata, por su tiempo y dedicación invertidos en la dirección de esta tesis, por sus numerosas y valiosas contribuciones y observaciones a este trabajo y también por su apoyo y orientación, que contribuyeron en mi formación durante mis estudios de maestría.

Agradezco también a mis sinodales, el Dr. Antonin Ponsich, el Dr. Miguel Ángel Gutierrez Limón y el Dr. Rogelio Hernández Suárez por sus valiosas aportaciones para la mejora y reflexión de este trabajo.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo económico otorgado durante mis estudios de maestría.

A la Universidad Autónoma Metropolitana, por todos los apoyos concedidos para mi formación durante la maestría.

Al laboratorio de Síntesis Optimización y Simulación de Procesos (SOS, UAM-I) por el espacio y recursos otorgados para la realización de este proyecto.

A todas las personas que de alguna manera me brindaron apoyo durante la realización de este proyecto.

# Contenido

<b>Resumen.....</b>	<b>i</b>
<b>Abstract.....</b>	<b>ii</b>
<b>Agradecimientos.....</b>	<b>iii</b>
<b>Lista de Figuras.....</b>	<b>vii</b>
<b>Lista de Tablas.....</b>	<b>xi</b>
<b>Capítulo 1 Introducción 1 .....</b>	<b>1</b>
1.1 El agua y su uso como recurso industrial .....	1
1.2 Tratamiento de efluentes industriales .....	2
1.3 El problema de síntesis de redes de tratamiento de efluentes .....	3
1.3.1 Planteamiento formal del problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes .....	5
1.4 Enfoques para abordar el problema .....	6
1.5 Objetivos del Proyecto .....	9
<b>Capítulo 2 Antecedentes .....</b>	<b>10</b>
2.1 Introducción .....	10
2.2 Métodos conceptuales .....	12
2.3 Métodos de optimización .....	14
2.4 Métodos híbridos .....	20
<b>Capítulo 3 Modelo PNL-R .....</b>	<b>22</b>
3.1 Introducción .....	22



3.2 Descripción del modelo PNL-R .....	24
3.3 Modelo PNL-R .....	26
3.4 Ejemplos Ilustrativos .....	32
3.4.1 Ejemplo Ilustrativo 3.1 .....	32
3.4.2 Ejemplo Ilustrativo 3.2 .....	38
3.4.3 Ejemplo Ilustrativo 3.3 .....	45
3.4.4 Ejemplo Ilustrativo 3.4 .....	47
3.5 Conclusiones .....	51
<b>Capítulo 4 Multi-arranque estocástico .....</b>	<b>52</b>
4.1 Introducción .....	52
4.2 Descripción de la técnica de multi-arranque estocástico .....	54
4.3 Problemas Ilustrativos .....	56
4.3.1 Problema Ilustrativo 4.1 .....	57
4.3.2 Problema Ilustrativo 4.2 .....	61
4.4 Conclusiones .....	64
<b>Capítulo 5 Resultados .....</b>	<b>65</b>
5.1 Introducción.....	65
5.2 Problema 5.1 .....	66
5.3 Problema 5.2 .....	67
5.4 Problema 5.3 .....	71
5.5 Problema 5.4 .....	73
5.6 Problema 5.5 .....	74

5.7 Problema 5.6 .....	76
5.8 Problema 5.7 .....	79
5.9 Problema 5.8 .....	82
5.10 Problema 5.9 .....	84
5.11 Problema 5.10 .....	86
5.12 Problema 5.11 .....	89
5.13 Problema 5.12 .....	93
5.14 Resumen de resultados .....	97
 <b>Capítulo 6 Conclusiones .....</b>	<b>99</b>
6.1 Introducción .....	99
6.2 Contribuciones del proyecto .....	100
6.3 Conclusiones generales .....	101
6.4 Observaciones y trabajo a futuro .....	102
 <b>Referencias bibliográficas .....</b>	<b>105</b>

## Lista de Figuras

Fig. 1.1 Principales Industrias con alto consumo de agua (Ranade y Bhandari, 2014).....	2
Fig. 1.2 Esquema de sistema de tratamiento centralizado con tres corrientes y tres unidades de tratamiento.....	4
Fig. 1.3 Esquema de un sistema de tratamiento distribuido para un sistema de tres corrientes y tres unidades de tratamiento. ....	4
Fig. 1.4 Ejemplo de gráfica de curva compuesta y línea de tratamiento, que corresponde a la línea continua inferior. La intersección de ambas corresponde al punto de pliegue (Wang y Smith, 1994). .....	7
Fig. 1.5 Ejemplo de superestructura de red para un sistema de 3 corrientes y 3 unidades de tratamiento (Hernández-Suárez y col., 2004). ....	8
Fig. 2.1 Diferentes esquemas de sistemas de uso y tratamiento de agua en plantas de proceso (Bagajewicz, 2000). ....	11
Fig. 3.1 Ejemplo de superestructura de red para un sistema de 3 corrientes y 3 unidades de tratamiento (Hernández-Suárez y col., 2004).....	26
Fig. 3.2 Superesctructura de red a optimizar en el Ejemplo Ilustrativo 3.1). ....	34
Fig 3.3 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.1, con un CTA de \$107,012.14. Se indican los flujos de efluente (t/h) en cursivas y a) los vectores de flujos másicos (kg/h), que son las variables de este modelo, y b) los vectores de concentraciones (ppm), respectivamente, con fuente normal . ....	37
Fig 3.4 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.2, con un flujo total tratado de 80.779 t/h. Se indican los flujos de efluente (t/h) en cursivas y a) los vectores de flujos másicos (kg/h), que son las variables de este modelo, y b) los vectores de concentraciones (ppm), respectivamente, con fuente normal .....	44
Fig. 3.5 Superesctructura de red a optimizar en el Ejemplo Ilustrativo 3.3 . ....	46
Fig 3.6 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.3 con un flujo total tratado de 99.495 t/h. Se indican los flujos de efluente (t/h) en cursivas y a) los vectores de flujos másicos (kg/h), que son las variables de este modelo, y b) los vectores de concentraciones (ppm), respectivamente, con fuente normal .....	47

Fig. 3.7 Superestructura de red a optimizar en el Ejemplo Ilustrativo 3.4.....	49
Fig 3.8 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.4, con un flujo total tratado de 161.88 t/h. Se indican los flujos de efluente (t/h) en cursivas y a) los vectores de flujos máxicos (kg/h), que son las variables de este modelo, y b) los vectores de concentraciones (ppm), respectivamente, con fuente normal. ....	50
Fig. 4.1 Ilustración de diferentes óptimos locales en una función objetivo no convexa. El punto $x_1$ es el óptimo global de la función en el dominio de la variable de decisión. Los puntos $x_2$ y $x_3$ son soluciones óptimas locales distintas (Chong y Zak, 2001). ....	53
Fig. 4.2 Metodología de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases (Nuñez-Serna y Zamora, 2016).....	54
Fig. 4.3 Superestructura de red a optimizar en el Problema Ilustrativo 4.1. ....	56
Fig. 4.4 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema Ilustrativo 4.1, con un flujo total tratado de 513 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. ....	60
Fig. 4.5 Diseño alternativo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema Ilustrativo 4.1, con un flujo total tratado de 515.1 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. ....	60
Fig. 4.6 Superestructura a optimizar en el Problema Ilustrativo 4.2.....	62
Fig. 4.7 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema Ilustrativo 4.2, con un flujo total tratado de 109.4 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal ....	63
Fig. 5.1 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.1 con un flujo total tratado de 59.798 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. ....	67
Fig. 5.2 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.2 correspondiente a la Solución 6 de la Tabla 5.5, con un CTA de 107012.14 \$/año y concentraciones de descarga de 60, 41.88 y 67.02 ppm. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. ....	70
Fig. 5.3 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.2 correspondiente a la Solución 2 de la Tabla 5.5, con un CTA de 107012.14 \$/año y concentraciones de descarga de 60,	

50 y 67.02 ppm. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. ....	70
Fig.5.4 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.3 con un flujo total tratado de 130.703 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. ....	72
Fig. 5.5 Diseño óptimo global del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.4, con un flujo total tratado de 89.84 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. ....	74
Fig 5.6. Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.5 con un flujo total tratado de 238.13 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. ....	76
Fig. 5.7 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.6 con un flujo total tratado de 173.478 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. ....	78
Fig. 5.8 Diseño propuesto por Kuo y Smith para el sistema de tratamiento del Problema 5.7, el cual tiene un CTA de 390455.70 \$/año. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas. ....	80
Fig. 5.9. Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.7, con un CTA de 351968.07 \$/año. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. . ....	81
Fig. 5.10 Diseño alternativo del sistema de tratamiento del Problema 5.7, con un CTA de 352718.23 \$/año. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. ....	82
Fig. 5.11 Diseño alternativo del sistema de tratamiento del Problema 5.8, con un flujo total tratado de 229.7 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. . ....	84
Fig. 5.12 Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.9, con un flujo total tratado de 1358.67 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. . ....	86

Fig. 5.13. Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.10, con un flujo total tratado de 124.359 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. . . . .	88
Fig. 5.14 Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.10 reportado por Castro y col. (2009), con un flujo total tratado de 124.359 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.. . . .	89
Fig. 5.15 Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.11, con un flujo total tratado de 321.56m <sup>3</sup> /s. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (m <sup>3</sup> /s) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal. . . . .	92
Fig. 5.16 Diseño del sistema de tratamiento del Problema 5.11 reportado por Li y col. (2015), con un flujo total tratado de 337.64 m <sup>3</sup> /s. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (m <sup>3</sup> /s) en cursivas. . . . .	93
Fig. 5.17 Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.12, con un flujo total tratado de 176.19 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal . . . . .	96

## Lista de Tablas

Tabla 1.1 Usos típicos del agua en la industria química y afines (Ranade y Bhandari, 2014) .....	1
Tabla 3.1 Características de modelos de PNL de la literatura para problemas de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes y del modelo PNL-R .....	23
Tabla 3.2 Datos de las corrientes efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.1.....	33
Tabla 3.3 Datos de la unidad de tratamiento y límites ambientales permitidos en la descarga en el Ejemplo Ilustrativo 3.1 .....	33
Tabla 3.4 Datos de las corrientes efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.2.....	38
Tabla 3.5 Datos de la unidad de tratamiento del Ejemplo Ilustrativo 3. 2.....	39
Tabla 3.6 Datos de las corrientes efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.3.....	45
Tabla 3.7 Datos de los procesos de tratamiento del Ejemplo Ilustrativo 3.3.....	45
Tabla 3.8 Características de las corrientes efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.4.....	48
Tabla 3.9 Datos de la unidad de tratamiento y límites ambientales permitidos en la descarga en el Ejemplo Ilustrativo 3.4.....	48
Tabla 4.1 Datos de las corrientes efluentes del Ejemplo Ilustrativo 4.1 .....	57
Tabla 4.2 Datos de los procesos de tratamiento del Ejemplo Ilustrativo 4.1.....	57
Tabla 4.3 Diferentes soluciones obtenidas para el Ejemplo Ilustrativo 4.1.....	59
Tabla 4.4 Datos de las corrientes efluentes del Ejemplo Ilustrativo 4.2.....	59
Tabla 4.5 Datos de los procesos de tratamiento del Ejemplo Ilustrativo 4.2.....	61
Tabla 4.6 Diferentes soluciones obtenidas para el Ejemplo Ilustrativo 4.2.....	63
Tabla 5.1 Características de los problemas abordados con la técnica de multi-arranque estocástico.....	66
Tabla 5.2 Datos de las corrientes efluentes del Ejemplo 5.1 .....	67
Tabla 5.3 Características de las corrientes efluentes del Problema 5.2.....	68

Tabla 5.4 Relaciones de remoción de la UT y límites ambientales permitidos para cada contaminante del Problema 5.2.....	69
Tabla 5.5 Características principales de 6 soluciones obtenidas para el Problema 5.2 y su frecuencia.....	69
Tabla 5.6 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.3.....	71
Tabla 5.7 Datos de las unidades de tratamiento del Problema 5.3.....	72
Tabla 5.8 Óptimos locales obtenidos para el Problema 5.3.....	72
Tabla 5.9 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.4.....	73
Tabla 5.10 Datos de las unidades de tratamiento del Problema 5.4.....	73
Tabla 5.11 Soluciones obtenidas para el Problema 5.4.....	74
Tabla 5.12 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.5.....	75
Tabla 5.13 Datos de las unidades de tratamiento y límites ambientales permitidos para cada contaminante del Problema 5.5.....	75
Tabla 5.14 Óptimos locales diferentes obtenidos para el sistema de tratamiento del Problema 5.5.....	75
Tabla 5.15 Datos de las corrientes efluentes de Problema 5.6.....	77
Tabla 5.16. Datos de las unidades de tratamiento en el Problema 5.6.....	77
Tabla 5.17 Principales características de los óptimos locales obtenidos para el Problema 5.6.....	78
Tabla 5.18. Funciones de costos y datos económicos del Problema 5.7.....	79
Tabla 5.19 Características de las soluciones obtenidas para el Problema 5.7.....	80
Tabla 5.20 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.8.....	82
Tabla 5.21 Tasas de remoción de los procesos de tratamiento del Problema 5.8.....	83
Tabla 5.22 Soluciones óptimas locales obtenidas para el Problema 5.8 .....	83
Tabla 5.23 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.9.....	85
Tabla 5.24 Datos de los procesos de tratamiento del Problema 5.9.....	85



Tabla 5.25 Mejores soluciones obtenidas para el Problema 5.9.....	85
Tabla 5.26. Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.10.....	86
Tabla 5.27 Datos de los Procesos de tratamiento del Problema 5.10.....	86
Tabla 5.28. Soluciones reportadas en la literatura para el Problema 5.10.....	87
Tabla 5.29 Características de las mejores soluciones obtenidas para el Problema 5.10.....	87
Tabla 5.30. Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.11.....	90
Tabla 5.31. Datos de los procesos de tratamiento del Problema 5.11.....	90
Tabla 5.32 Soluciones obtenidas para el Problema 5.11 y sus principales características.....	91
Tabla 5.33 Soluciones reportadas en la literatura para el Problema 5.11 .....	91
Tabla 5.34 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.12.....	95
Tabla 5.35 Soluciones obtenidas para el Problema 5.12 y sus principales características.....	95
Tabla 5.36 Resultados obtenidos y comparación con la literatura.....	97
Tabla 5.37 Tiempo de cómputo, cantidad de puntos factibles y óptimos locales obtenidos para cada problema abordado con el algoritmo de multi-arranque estocástico en 1000 iteraciones.....	98

---

# Capítulo 1

## INTRODUCCIÓN

---

### 1.1 El agua y su uso como recurso industrial

El agua es un recurso fundamental para el desarrollo y bienestar del ser humano. En la actualidad, el agua es también un recurso esencial para las industrias de proceso; en prácticamente cualquier tipo de industria, el agua desempeña diferentes funciones en una o varias etapas del proceso de producción, la mayor parte de esta agua termina como efluentes. Algunos usos típicos del agua en la industria química e industrias afines y el grado de contaminación de los efluentes generados se muestran en la Tabla 1.1.

Tabla 1.1 Usos típicos del agua en la industria química y afines (Ranade y Bhandari, 2014).

Uso	Volumen	Nivel de contaminación
Reactivo	Bajo	Alto
Solvente	Bajo	Alto
Limpieza/Agente de separación	Medio	Medio
Agua de enfriamiento	Alto	Bajo
Calderas	Alto	Bajo

En cada tipo de industria se consumen distintas cantidades de agua con diferentes propósitos. En la industria de fertilizantes por ejemplo, el agua es empleada principalmente como reactivo en los procesos de producción de fertilizantes de nitrógeno y fosfato. En la industria minera, el agua es utilizada para el lavado de menas y en el proceso de flotación de minerales principalmente. En las refinerías de petróleo, el agua se usa en los procesos de fraccionamiento del crudo, en la síntesis de algunos productos y en desalinización, entre otros. Las industrias del hierro y acero emplean grandes volúmenes de agua para el enfriamiento de altos hornos y máquinas de fundición y depurado de gases; la conversión del acero en láminas y cables requiere de etapas de calentamiento y enfriamiento en las que comúnmente se utiliza agua como lubricante y como medio de enfriamiento. En las industrias alimentarias, como la cervecera o la lechera, el agua se usa para limpiar equipo y como vapor en los evaporadores, los residuos se caracterizan por una alta demanda bioquímica de oxígeno (DBO). La industria farmacéutica utiliza agua principalmente para la

limpieza de equipo, aunque el volumen de efluentes generado no es muy grande se encuentra altamente contaminado con compuestos orgánicos (Bagajewicz, 2000, Ranade y Bhandari, 2014, International Water Association, 2017).

Las centrales térmicas, la industria de pulpa y papel y la refinación de petróleo se encuentran entre las principales consumidoras de agua. En la Fig.1.1 se muestra el consumo de agua de algunas industrias, el consumo se reporta como litros de agua consumidos por tonelada de producto.

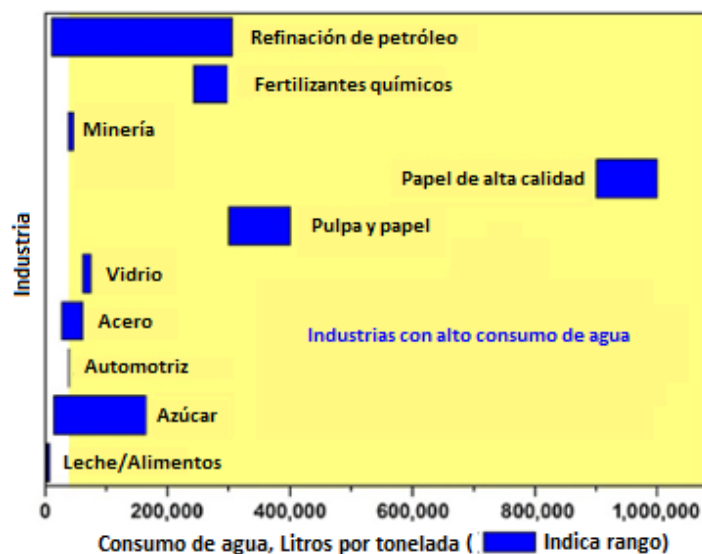


Fig. 1.1 Principales industrias con alto consumo de agua (Ranade y Bhandari, 2014).

### 1.2 Tratamiento de efluentes industriales

Los efluentes generados por las industrias de proceso en las distintas etapas de sus procesos de producción, dependiendo de su origen contienen diferentes cantidades de sustancias que pueden ser tóxicas y/o dañinas para el medio ambiente, tales como sólidos suspendidos (SS), aceites, sulfuros, ácidos, metales pesados y otras sustancias orgánicas e inorgánicas.

Con la finalidad de proteger al medio ambiente y a las comunidades humanas, existen legislaciones que regulan la descarga de efluentes, para poder ser descargados en cloacas municipales o cuerpos de agua, los efluentes deben cumplir con ciertas especificaciones y no rebasar los límites ambientales permitidos para DBO, demanda química de oxígeno (DQO) y concentraciones de sustancias dañinas. Por otro lado, la escasez de agua ha despertado un creciente interés en el reúso

de ésta y, en ocasiones, el tratamiento de efluentes permite reutilizar corrientes de proceso en operaciones que demandan agua de calidad relativamente baja (ver por ejemplo Feng y Shu, 2004).

Para cumplir con las especificaciones de descarga o reúso, los efluentes reciben tratamiento en uno o más procesos físicos, químicos y/o biológicos. Comúnmente en refinerías y otras plantas químicas estos procesos se agrupan en tres etapas, cada etapa puede abarcar varias tecnologías de tratamiento (Metcalf and Eddy Inc., 1991).

**Tratamiento Primario.** Agrupa procedimientos de limpieza básica, generalmente de naturaleza física, como remoción de sólidos suspendidos, clarificación y acondicionamiento de pH, para evitar daños en los equipos y remover material que ocupa espacio sin ser tratado.

**Tratamiento Secundario.** Procedimientos biológicos y fisicoquímicos que remueven sustancias solubles. Típicamente entre 85-95% de la DQO y Sólidos Suspendidos Totales (SST) son removidos en esta etapa (Ranade y Bhandari, 2014).

**Tratamiento Terciario.** Se aplican procedimientos de desinfección y remoción de contaminantes específicos como nitrógeno y fósforo. También se conoce como tratamiento de efluentes avanzado.

Según el tipo de contaminantes presentes en los efluentes y sus concentraciones y considerando además el uso que desea darse al agua tratada, se eligen los procesos de tratamiento más adecuados para estos en cada etapa y si es necesario se pueden incluir etapas de pretratamiento o tratamiento avanzado, o bien prescindir de alguna de las mencionadas (Spellman, 2013).

El conjunto de todos los procesos de tratamiento que se emplean para tratar un grupo de corrientes constituye un sistema de tratamiento. Los sistemas de tratamiento suelen ser muy costosos y afectan la rentabilidad de las industrias, por lo que se busca diseñar sistemas que cumplan con las especificaciones de descarga al menor costo posible.

### **1.3 El problema de síntesis de redes de tratamiento de efluentes**

Una vez que se ha definido el tipo y la cantidad de procesos de tratamiento que deben utilizarse en un sistema para llevar las corrientes efluentes a las condiciones requeridas en el punto de descarga, debe definirse la secuencia más adecuada de los procesos y que corrientes serán tratadas en cada uno de ellos.

Tradicionalmente, en la industria se han empleado sistemas de tratamiento centralizado, los cuales se caracterizan por mezclar todas las corrientes efluentes provenientes de distintos puntos, como la planta de proceso, servicios auxiliares, laboratorios, etc. antes de enviarlas a un tratamiento secuencial, como el que se muestra en la Fig.1.2.

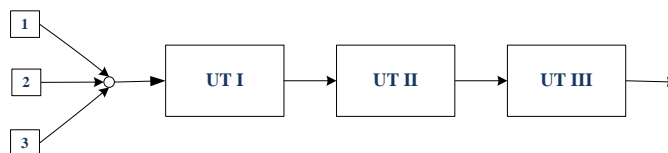


Fig. 1.2 Esquema de sistema de tratamiento centralizado con tres corrientes y tres unidades de tratamiento.

Al mezclar todas las corrientes y tratarlas de manera conjunta se incrementa el volumen tratado en cada proceso y los contaminantes se diluyen, es decir disminuye la concentración en las corrientes que serán tratadas, esto puede afectar la eficiencia y el costo del sistema de tratamiento. McLaughlin y col. (1992) señalaron que los costos de capital son proporcionales al flujo tratado en la mayoría de las operaciones de tratamiento y que para una cierta carga másica de contaminante a remover, la eficiencia disminuye y el costo de operación aumenta con la disminución de concentración en la corriente tratada.

Es posible que no sea necesario tratar la totalidad de los efluentes para cumplir con las especificaciones de descarga. En un sistema de tratamiento distribuido, como el que se muestra en la Fig. 1.3, cada corriente puede tratarse de manera total o parcial en uno o varios de los procesos de tratamiento según se requiera y se mezcla con otras corrientes solo cuando es conveniente.

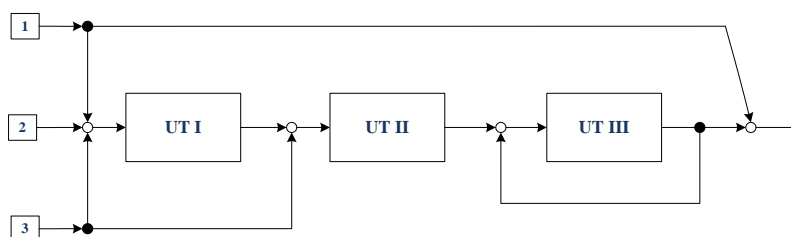


Fig. 1.3 Esquema de un sistema de tratamiento distribuido para un sistema de tres corrientes y tres unidades de tratamiento.

El problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes consiste en obtener la topología de la red (arreglo y conectividad de los procesos de tratamiento) y las condiciones de operación con los que se minimizan los costos del sistema y se cumple con las especificaciones de descarga para un conjunto de contaminantes en un grupo de corrientes efluentes. Este es un problema muy complejo, pues frecuentemente para un caso dado existe una cantidad considerable

de diseños con los que pueden satisfacerse las especificaciones de descarga, de entre los cuales debe determinarse el de menor costo.

### **1.3.1 Planteamiento formal del Problema de Síntesis de Sistemas de Tratamiento Distribuido de Efluentes**

A continuación se describe de manera formal el problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes abordado en este trabajo.

Dada la siguiente información:

Un conjunto de corrientes efluentes  $I$  con diferentes flujos  $S_i$ ,  $i \in I$ , contiene un conjunto de contaminantes  $J$  con distintas concentraciones en cada corriente,  $C_{i,j}$ ,  $i \in I$ ,  $j \in J$ . Se dispone de un conjunto de unidades de tratamiento,  $K$ , cada una remueve hasta cierto grado un subconjunto de los contaminantes presentes en las corrientes efluentes, estas unidades se caracterizan por tasas de remoción  $R_{j,k}$ ,  $j \in J$ ,  $k \in K$ . Las corrientes deben tratarse en las unidades de tratamiento de manera que todos los contaminantes tengan concentraciones por debajo de los límites ambientales permitidos,  $c_{j,e}^U$ , en el punto de descarga.

La tarea de diseño consiste en:

Determinar la topología y las condiciones de operación del sistema de tratamiento con los que se obtiene la remoción requerida de los contaminantes al menor costo.

Se consideran las siguientes suposiciones de trabajo:

- i) No hay pérdidas de agua residual en el sistema.
- ii) Las tasas de remoción en las unidades de tratamiento son constantes.

Las suposiciones de trabajo se hacen con el objetivo de volver más manejable el problema abordado, al respecto se hacen algunas observaciones. En la literatura se asume comúnmente que no hay pérdidas en los sistemas de uso y tratamiento de agua, una excepción es el trabajo de Alva-Argáez y col. (1998), quienes consideraron las pérdidas de agua en su modelo de sistemas de uso y tratamiento de agua. Por otro lado, existen dos formas usuales de modelar los procesos de tratamiento en la literatura: tasas de remoción constantes o concentraciones de salida fijas cuando éstas describen mejor la operación de un proceso, como la filtración, por ejemplo; de esta manera se generan modelos lineales para las unidades de tratamiento. En algunos pocos trabajos se han considerado modelos más detallados de los procesos de tratamiento, sin embargo estos enfoques

generalmente se limitan a sistemas con una sola tecnología de tratamiento (Jezowski, 2010). Si bien, la mayoría de los procesos de tratamiento están caracterizados por ecuaciones cinéticas complicadas en las que las tasas de remoción varían en función de la concentración del contaminante a remover, el estudio de la cinética de los procesos de tratamiento constituye en sí mismo un problema complejo que está fuera del alcance de este trabajo, por lo que se asume que se dispone de valores de tasas de remoción típicos a las condiciones nominales de operación. Si estos valores han sido estimados adecuadamente, los resultados obtenidos al incorporar ecuaciones cinéticas en el modelo deben ser muy cercanos o iguales a los obtenidos modelando las unidades de tratamiento con tasas de remoción constantes. Por otro lado, la incorporación de las distintas ecuaciones cinéticas de reacción para cada contaminante en cada uno de los distintos procesos de tratamiento significaría incrementar significativamente las no convexidades del modelo, complicando la solución del mismo.

### **1.4 Enfoques para abordar el problema**

Para abordar este problema se han propuesto distintas metodologías que pueden agruparse en dos clases de acuerdo al enfoque de solución que emplean: los métodos conceptuales o heurísticos y los métodos de optimización de una superestructura de red.

#### **Métodos Conceptuales**

Los métodos conceptuales son métodos usualmente secuenciales que utilizan principios básicos de ingeniería y termodinámica. El más representativo de éstos es el método del punto de pliegue, análogo al utilizado en la síntesis de redes de intercambio de calor (Linnhoff y Hindmarch, 1983), que en el contexto del diseño de redes de uso de agua y de tratamiento de efluentes también se conoce como “water pinch”. La mayoría de los trabajos que utilizan este enfoque se basan en los conceptos y técnicas propuestos en el trabajo de Wang y Smith (1994), cuya metodología fue mejorada posteriormente por Kuo y Smith (1997), quienes introdujeron el concepto de degradación de efluentes para establecer la secuencia de las unidades de tratamiento.

El método del punto de pliegue para diseño de sistemas de tratamiento de un contaminante es un procedimiento gráfico y secuencial de dos etapas, una de determinación de objetivos y otra de desarrollo de la red. En la primera etapa se construye una curva compuesta en la que se grafican las cargas másicas a remover de las corrientes efluentes por intervalos de concentración, se grafica también una línea de tratamiento y se determina un punto de pliegue, donde ambas gráficas se

intersecan (Fig. 1.4). Utilizando la gráfica se determinan el flujo mínimo a tratar y la concentración de entrada en cada unidad de tratamiento. El punto de pliegue divide a las corrientes en tres grupos:

- i) Corrientes con concentración mayor al punto de pliegue
- ii) Corrientes con concentración igual al punto de pliegue
- iii) Corrientes con concentración menor al punto de pliegue.

En base a dicha clasificación se desarrolla la red, las corrientes del grupo I se tratan totalmente, el grupo II recibe tratamiento parcial y el grupo III no recibe tratamiento.

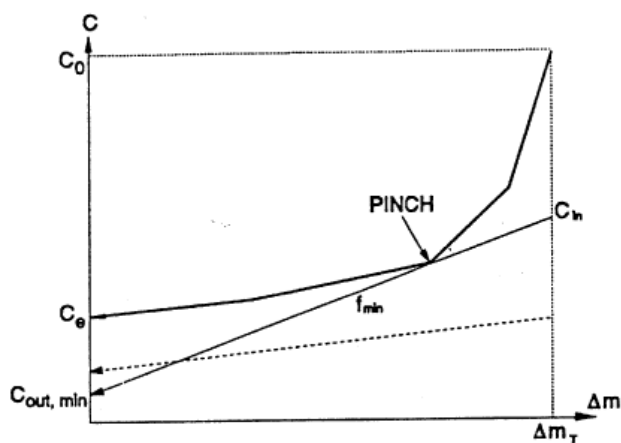


Fig. 1.4 Ejemplo de gráfica de curva compuesta y línea de tratamiento, que corresponde a la línea continua inferior. La intersección de ambas corresponde al punto de pliegue (Wang y Smith, 1994).

Aunque Wang y Smith proponen una extensión de su metodología para sistemas multi-contaminante, la metodología es utilizada solo para el diseño de sistemas de un solo contaminante, pues este enfoque no puede ser aplicado de manera efectiva a sistemas con múltiples corrientes y múltiples contaminantes (Bagajewicz, 2000).

### Métodos de optimización

Otro enfoque para abordar este problema consiste en la optimización matemática de una superestructura de red como la que se muestra en la Fig. 1.5, la superestructura debe incluir todas las conexiones entre corrientes y unidades de tratamiento que se consideren viables; al optimizar la superestructura se obtiene el diseño de menor costo para el sistema de tratamiento. El problema de optimización puede abordarse utilizando técnicas de optimización heurísticas o metaheurísticas con elementos aleatorios (como los algoritmos genéticos o el recocido simulado), algoritmos de optimización global determinista o técnicas de programación matemática.



La superestructura de un sistema de tratamiento distribuido de efluentes está compuesta por las corrientes efluentes que ingresan al sistema y los procesos de tratamiento disponibles, además de divisores y mezcladores, que se representan con puntos negros y puntos blancos respectivamente en la Fig. 1.5. Existen divisores iniciales para cada corriente y divisores en las unidades de tratamiento, desde los cuales las corrientes pueden enviarse a uno o varios de los procesos de tratamiento o a la descarga, además de mezcladores para las corrientes enviadas a cada uno de los procesos de tratamiento y al punto de descarga. La corriente que sale del mezclador en el punto de descarga debe tener concentraciones por debajo de los límites ambientales permitidos para cada uno de los contaminantes involucrados.

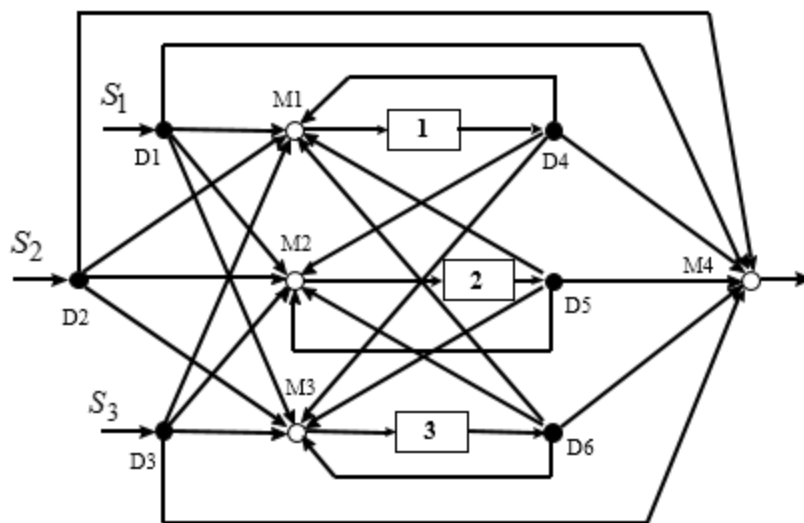


Fig. 1.5 Ejemplo de superestructura de red para un sistema de 3 corrientes y 3 unidades de tratamiento  
(Hernández-Suárez y col., 2004).

Para optimizar la superestructura debe generarse un modelo matemático asociado a esta, el cual comprende balances de materia en los divisores, mezcladores y unidades de tratamiento. Generalmente el modelo resultante es un modelo no convexo de programación no lineal (PNL), o en ocasiones debido al uso de variables binarias en algunas formulaciones, de Programación No Lineal Entera Mixta (PNL-EM). Dichos modelos son muy difíciles de optimizar globalmente y al aumentar la cantidad de variables y ecuaciones que describen un modelo, resulta más complicado obtener una solución óptima global.

### 1.5 Objetivos del Proyecto

En esta tesis se aborda el problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes con el enfoque de optimización de una superestructura de red, para lo cual se propone la aplicación de una metodología que combina un método de inicialización estocástico con un algoritmo de PNL.

El objetivo general del proyecto es aplicar un enfoque de optimización con multi-arranque estocástico al problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes.

Los objetivos específicos son los siguientes:

1. Formular y validar un modelo de programación no lineal (PNL) para la síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes.
2. Aplicar una metodología de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases para resolver el modelo de PNL desarrollado en un conjunto de casos de estudio.
3. Validar la metodología propuesta.
4. Definir alcances y limitaciones de la metodología con base en los resultados obtenidos.

---

## Capítulo 2

# ANTECEDENTES

---

### 2.1 Introducción

El problema de diseño de redes de agua se formuló por primera vez en el trabajo seminal de Takama y col. (1980), quienes abordaron el problema que actualmente se conoce como red de agua total (en inglés “Total Water Network”, TWN), que engloba el diseño simultáneo de redes de uso eficiente de agua y redes de tratamiento de efluentes. Con el objetivo de diseñar sistemas con uso eficiente de agua fresca, baja descarga de efluentes y costo mínimo, con estructuras como la mostrada en la Fig. 2.1 (d), Takama y col. propusieron la optimización de una superestructura de red compuesta de procesos que demandan agua de diferente calidad y procesos de tratamiento de efluentes; de esta superestructura resulta un modelo de PNL complejo para el que los autores proponen un procedimiento iterativo de solución haciendo uso del método Complex (Box, 1960), una evolución del método Simplex (Spendley y col., 1962; Nelder y Mead, 1965). Al aplicar su metodología al sistema de uso y tratamiento de agua en una refinería, Takama y col. obtuvieron un diseño que disminuye los costos del sistema y el consumo de agua fresca en comparación con el sistema centralizado en operación, como el que se muestra en la Figura 2.1 (a).

En la Fig. 2.1 se muestran distintos esquemas de uso y tratamiento de agua. Durante años se ha empleado en la industria el esquema de la Fig. 2.1 (a), en el que se consume agua fresca en todos los procesos que requieren agua y los efluentes generados se mezclan y se envían a un tratamiento centralizado; la escasez de agua ha motivado el reuso de esta, generando diseños como el del esquema 2.1 (b); el diseño de redes de uso eficiente de agua y redes de tratamiento de efluentes por separado genera esquemas como el de la Fig. 2.1 (c), mientras que el problema de la red de agua total busca obtener diseños como el de la Fig. 2.1 (d), en los que de ser posible, el agua tratada en algunos de los procesos de tratamiento se reutiliza, disminuyendo el consumo de agua fresca y en ocasiones la generación de efluentes.

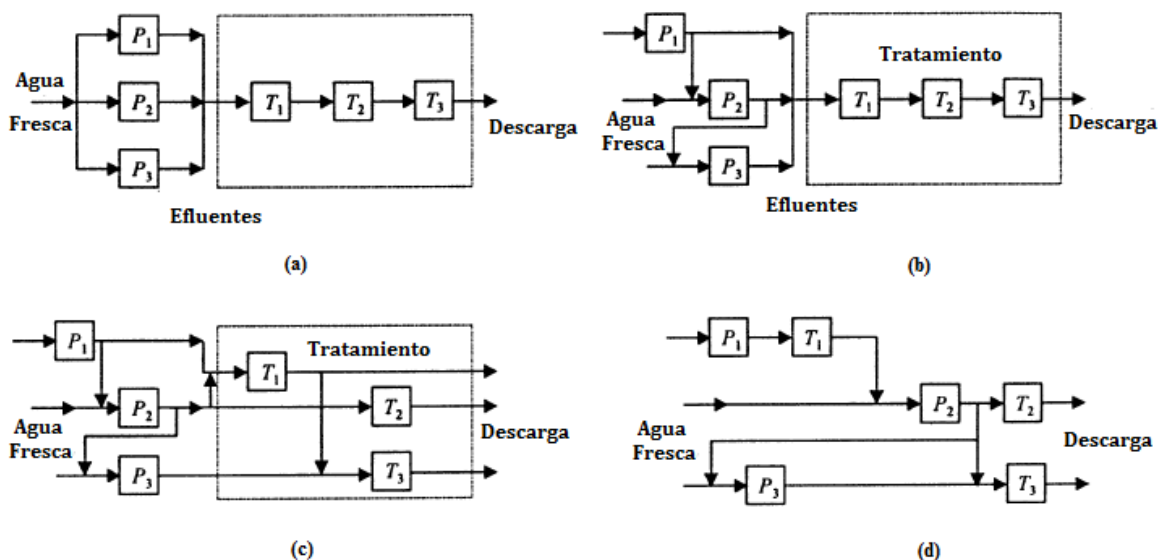


Fig. 2.1 Diferentes esquemas de sistemas de uso y tratamiento de agua en plantas de proceso (Bagajewicz, 2000).

A pesar de las ventajas de abordar el problema de diseño de redes de uso de agua y tratamiento de efluentes de manera simultánea, generando diseños como el de la Fig. 2.1 (d), debido a la complejidad del problema, Wang y Smith (1994) propusieron dividir el problema ahora conocido como red de agua total en dos subproblemas: diseño de redes de uso eficiente de agua y diseño de redes de tratamiento de efluentes; a partir de entonces se han propuesto diversas metodologías enfocadas a resolver cada uno de estos problemas por separado. Con el aumento en la capacidad computacional de los equipos se han empezado a proponer algunas metodologías que de manera simplificada abordan nuevamente el problema de red de agua total (por ejemplo, Tsai y Chang, 2001; Putra y Amminudin, 2008) o incluso redes integradas tratamiento de efluentes y uso eficiente de agua y energía, como los trabajos de Kim y col. (2009) y Ahmetovic y col. (2014).

El problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes ha sido ampliamente abordado en la literatura, generándose distintas metodologías, que en algunos casos han sido aplicadas a problemas de la industria. A continuación se describen los aspectos principales de las propuestas desarrolladas en este campo desde que apareció el problema hasta los trabajos más recientes, agrupando las metodologías según el enfoque de solución empleado como métodos conceptuales, métodos de optimización y métodos híbridos, en los que los autores de estos métodos buscan aprovechar las ventajas de ambos enfoques.

### 2.2 Métodos conceptuales

Los métodos conceptuales, como el método del punto de pliegue (Wang y Smith, 1994; Kuo y Smith, 1997) hacen uso de conocimientos básicos de ingeniería y termodinámica para generar diseños de sistemas de tratamiento de efluentes. Las metodologías de este tipo generalmente son secuenciales y el diseño se obtiene por etapas. Si bien no se puede garantizar optimalidad para un diseño generado por medio de alguna de estas metodologías, en ocasiones pueden obtenerse diseños similares a los obtenidos por medio de programación matemática de manera más sencilla.

En 1994, Wang y Smith propusieron métodos para la síntesis de redes de uso eficiente de agua y redes de tratamiento de efluentes basados en el método del punto de pliegue, desarrollado inicialmente para redes de intercambio de calor, dando origen a lo que se conoce como “water pinch”. Kuo y Smith (1997) señalaron algunas deficiencias de la metodología propuesta por Wang y Smith, principalmente que la metodología falla en la determinación de flujo mínimo a enviar a tratamiento para sistemas con múltiples unidades; para identificar el punto de pliegue y determinar adecuadamente el flujo mínimo a tratar en el sistema en este caso, proponen la construcción de una línea de tratamiento compuesta, generada a partir de las líneas de tratamiento individuales de cada unidad de tratamiento. Kuo y Smith introducen además el concepto de degradación de efluentes, que toma en cuenta las pérdidas de exergía debido al mezclado de corrientes de diferente concentración, el cual utilizan para elegir la secuencia más adecuada de las unidades de tratamiento. Según esta propuesta, deben explorarse todos los posibles arreglos de las unidades, de entre los cuales se elige el que genera las menores pérdidas de exergía, se considera además la posibilidad de obtener diseños de tratamiento en paralelo, en los cuales la corriente de salida de una unidad de tratamiento no ingresa a la siguiente unidad, en ocasiones esta estructura resulta una opción atractiva que no puede obtenerse con la metodología original de Wang y Smith (1994).

Si bien la metodología del punto de pliegue tiene sus limitaciones, ha ayudado a entender mejor el problema de síntesis de sistemas de tratamiento de efluentes y los conceptos y técnicas introducidos por Wang y Smith (1994) y Kuo y Smith (1997) han sido utilizados como base para otras metodologías conceptuales.

En el año 2000, Freitas y col. aplicaron un enfoque de diseño conceptual y jerárquico en el cual el sistema es diseñado por niveles de tratamiento: pre-primario, primario, secundario y terciario, desarrollando un prototipo de sistema para auxiliar en el diseño de sistemas de tratamiento de efluentes que usa una base de datos y reglas heurísticas.

Shi y Liu (2011) proponen el cálculo de un parámetro al que denominan potencial de flujo total tratado (en inglés TTFP, “total treatment flow rate potential”) basándose en el análisis del punto de pliegue. El TTFP es una medida del flujo mínimo que debe tratarse en una unidad de tratamiento para remover un contaminante dado de las corrientes hasta satisfacer el límite ambiental permitido de descarga, teniendo como base los valores de este parámetro para cada una de las unidades de tratamiento se determina la secuencia y se desarrolla la red.

Liu y col. (2013) propusieron un método conceptual de diseño que utiliza la técnica del punto de pliegue y un conjunto de reglas heurísticas propuestas por los autores, orientadas a disminuir el mezclado innecesario de corrientes. El procedimiento puede resumirse en tres pasos: (1) La principal función de cada proceso de tratamiento es identificada con base en sus tasas de remoción, (2) Con el método del punto de pliegue se calcula el flujo mínimo y corrientes a tratar en cada proceso considerando su función principal e ignorando los demás contaminantes, (3) Las unidades son clasificadas como no relevantes, relevantes e incluídas y se establecen reglas de precedencia con base en esta clasificación, dichas reglas toman en cuenta también los contaminantes secundarios cuando una unidad de tratamiento puede remover más de un contaminante. Las reglas propuestas por Liu y col. para el diseño de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes son prácticas y sencillas y en los problemas abordados en su trabajo se consiguen resultados similares a los obtenidos por medio de programación matemática. Sin embargo, como sucede a menudo con este tipo de metodologías, al abordar problemas con más variables los resultados obtenidos se vuelven menos satisfactorios, además en algunos casos las reglas propuestas pueden volverse ambiguas.

Debido a que es complicado abordar el problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes con métodos conceptuales, es común que se diseñen métodos en que se abordan casos particulares o un aspecto del problema.

Sahu y col. (2013), por ejemplo, abordaron el caso de sistemas de tratamiento para un contaminante con unidades de tratamiento caracterizadas por concentraciones de salida fijas, como la filtración, y sin restricciones en la concentración de contaminante en el efluente que ingresa a las unidades. Para abordar este tipo de problemas se propone un método algebraico que hace uso de los principios del punto de pliegue y del cálculo de lo que los autores llaman costo priorizado para el desarrollo de la red.

Soo y col. (2013) abordan el diseño de sistemas de tratamiento de uno o dos contaminantes extendiendo también los conceptos de la metodología gráfica del punto de pliegue. Con dicha metodología se pueden abordar sistemas con restricciones de concentración máxima en las unidades

de tratamiento y unidades caracterizadas tanto por tasas de remoción constantes como por concentraciones de salida fijas.

En 2015, Li y col. introducen un nuevo concepto para la minimización de mezclado innecesario de corrientes en el contexto del diseño conceptual de redes de tratamiento, el potencial de influencia de mezclado total (en inglés “total mixing influence potential”, TMIP), basándose también en el método del punto de pliegue. Li y col. (2015) señalan que en algunos casos el TTFP de Shi y Liu (2011) no puede reflejar adecuadamente el flujo mínimo total a tratar, sobre todo cuando se consideran corrientes con concentraciones muy bajas, por lo que proponen el cálculo del TMIP, que refleja la influencia del mezclado de corrientes en el flujo total tratado causado por utilizar una UT. La unidad de tratamiento con el menor valor de TMIP se establece primero en la secuencia. En el diseño de una red con base en este parámetro tampoco es posible considerar restricciones en la concentración de entrada de las unidades.

Recientemente, Li y col. (2016) propusieron un nuevo conjunto de reglas heurísticas para el diseño de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes que permite incorporar restricciones de concentración máxima a la entrada de las unidades, señalando la importancia de considerar este tipo de restricciones, pues mientras la tecnología de tratamiento de efluentes se desarrolla, existen cada vez más procesos de tratamiento disponibles y algunos procesos ampliamente utilizados como separación por membranas y reacciones bioquímicas requieren satisfacer restricciones en las concentraciones de entrada. Las reglas propuestas por Li y col. (2016) consideran las restricciones de concentración, el punto de pliegue para cada contaminante y los balances de carga másica de contaminante en las unidades de tratamiento para desarrollar el diseño. Estas reglas son sencillas y tienen un claro sentido físico y si bien no se puede probar optimalidad global, los resultados obtenidos siguiendo estas reglas son competitivos con aquellos obtenidos por medio de programación matemática, aunque al aumentar el número de variables de los problemas abordados el método se vuelve cada vez más complicado de aplicar.

### **2.2 Métodos de optimización**

La mayoría de las propuestas recientes para el diseño de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes se enfocan en la optimización matemática de una superestructura de red. Estos métodos permiten obtener de manera simultánea la topología y las condiciones de operación del sistema de tratamiento y en principio no existe un límite en el número de contaminantes, unidades de tratamiento y corrientes en los problemas que se abordan. Sin embargo, al formular matemáticamente la

superestructura de red a optimizar resultan modelos de PNL y PNL-EM, muy difíciles de resolver de manera global. En estos modelos aparecen términos bilineales en los balances de materia en mezcladores o divisores, dependiendo de como se formule el problema, los cuales generan no convexidades que causan que los algoritmos de solución de PNL, que dependen fuertemente del punto de arranque, puedan tener dificultades para obtener puntos de solución factibles y generalmente quedan estancados en un óptimo local, que en ocasiones no es una buena solución.

Para obtener una solución óptima global o bien una solución subóptima de calidad, es decir de bajo costo, para este tipo de problemas, existen algoritmos de optimización global determinista, que consumen altos tiempos de cómputo y garantizan la obtención de una solución óptima si la hay, y métodos de búsqueda meta-heurísticos, que si bien no pueden probar optimalidad global, si se realiza una exploración adecuada de la región factible pueden generar diseños con costos cercanos al óptimo global o incluso óptimos globales. La obtención de una solución óptima global o en su caso la calidad de la solución óptima local obtenida depende de factores como la formulación del problema, el algoritmo de solución y el punto de arranque empleado por este.

En el contexto de diseño de redes de agua, se han propuesto diferentes metodologías que se enfocan en alguno de los siguientes aspectos (Jezowski 2010): linealización de los modelos, generación de buenos puntos de arranque, procedimientos de solución secuenciales, enfoques de optimización meta-heurísticos y técnicas de optimización global determinista. Para el problema de síntesis de sistemas de tratamiento de efluentes, la mayoría de las propuestas se orientan a la formulación de relajaciones lineales del problema original y la generación de puntos de arranque.

Zamora y Grossmann (1998) aplicaron por primera vez una técnica de optimización global determinista al problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes utilizando una técnica de ramificación y acotamiento en dos fases.

Posteriormente, Galán y Grossmann (1998) señalaron que los métodos de optimización global determinista requieren un esfuerzo computacional significativo, que se consume principalmente buscando probar optimalidad global para una solución que frecuentemente se obtiene desde el inicio. Los autores propusieron un método de búsqueda heurístico en el que se generan algunos puntos de arranque para la solución de modelos de PNL o PNL-EM de sistemas de tratamiento de efluentes. En su trabajo, Galán y Grossmann proponen una formulación de PNL de una superestructura de red de tratamiento de efluentes y una formulación de PNL-EM para abordar el caso de selección de tecnologías, en el cual dos o más tecnologías de tratamiento distintas remueven uno o más contaminantes y debe elegirse una de ellas. A partir de la solución de una relajación lineal del



problema de PNL y de programación lineal entera mixta, PL-EM, para el modelo de PNL-EM con diferentes funciones objetivo se generan puntos de arranque para la solución del problema original, de los cuales generalmente se obtienen distintas soluciones y de entre las cuales se elige la de menor costo y puede usarse como cota superior del problema en algoritmos de optimización global determinista. A pesar de lo valioso del enfoque de solución propuesto por Galán y Grossmann, los puntos de arranque generados por su metodología son pocos y dependen de la cantidad de unidades de tratamiento en el problema abordado, lo que produce una exploración insuficiente de la región factible para problemas con una cantidad importante de contaminantes, corrientes y unidades de tratamiento.

Hernández-Suárez y col. (2004) propusieron otro enfoque para abordar el problema de optimización de la superestructura de red de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes, el cual consiste en descomponer el problema original en un conjunto de problemas más sencillos. Para realizar una búsqueda sistemática de un óptimo global, la superestructura compleja general es descompuesta en un conjunto de superestructuras básicas, cada una de ellas se optimiza y se obtienen varios diseños de red, de entre los cuales el mejor es seleccionado; ya que la inclusión de corrientes de reciclaje complica la representación matemática de la superestructura, los autores no las consideran en su trabajo. Cada superestructura básica difiere en la secuencia de las unidades de tratamiento y las corrientes fluyen de la fuente al punto de descarga, sin ciclos o recirculaciones. Fijando los valores de las fracciones de división se generan problemas de PL que se resuelven y generan puntos de arranque para resolver los problemas de PNL. Mediante una exploración sistemática se obtienen los valores de las fracciones de división y las condiciones de operación que optimizan cada superestructura básica. Con el método propuesto es muy probable obtener un óptimo global para el problema abordado, sin embargo, como los autores señalan, la efectividad del método disminuye considerablemente conforme aumenta el número de unidades de tratamiento disponibles. Por otro lado, si bien en muchos de los casos las corrientes de reciclaje son innecesarias, en algunos casos pueden resultar cruciales para lograr factibilidad como señalan Hernández-Suárez y col. (2008), Li y col. (2016) y Sueviryyapan y col. (2016).

Martín-Sistac y Graells (2005) proponen una formulación de PNL simplificada y abordan el problema con un procedimiento heurístico de solución, partiendo de diseños de tratamiento centralizados se realizan movimientos factibles en los valores de las fracciones de división que se aceptan solo si el valor de la función objetivo es mejorado, hasta que se obtiene una solución óptima local en términos del paso adoptado por el algoritmo. El algoritmo se repite partiendo de distintos

puntos de arranque que se optimizan localmente hasta cumplir con un criterio de paro, que puede ser el número de iteraciones realizadas.

En 2007, Poplewski y Jezowski aplicaron un método iterativo de búsqueda aleatoria adaptada (en inglés “adaptive random search”, ARS) al problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes. Aunque los métodos de ARS están orientados a problemas sin restricciones, los autores hacen algunas modificaciones al método para que las soluciones obtenidas satisfagan las restricciones del modelo de PNL, el algoritmo aplicado se describe en Jezowski y col. (2005). La idea general es disminuir el tamaño de la región de búsqueda en cada iteración, conforme se mejora el valor de la función objetivo; en cada iteración se obtienen un conjunto de puntos factibles generados con elementos aleatorios, de entre estos se elige el de menor costo, que se compara con la mejor solución obtenida en la iteración anterior. Se utilizan todas las secuencias de tratamiento centralizado posibles como puntos de arranque para aumentar la probabilidad de obtener una solución de alta calidad.

Castro y col. (2007) propusieron un método heurístico para el diseño óptimo de sistemas de tratamiento de efluentes que, al igual que el procedimiento propuesto por Galán y Grossmann (1998), utiliza la solución de relajaciones lineales como puntos de arranque de los modelos de PNL. Las relajaciones de PL consideran una superestructura simplificada de la que se eliminan los divisores, pues los balances de materia en estos puntos generan términos bilineales en el modelo utilizado, de esta manera el problema puede ser formulado con un modelo de PL. Para considerar los diseños con arreglos en serie se incluyen en la superestructura simplificada subsistemas de tratamiento compuestos de dos o más unidades y se formulan modelos de PL para cada secuencia posible, las soluciones a estos problemas constituyen los puntos de arranque para el modelo de PNL. Los autores comparan el desempeño del algoritmo con dos formulaciones distintas, con dos resolutores de PNL, GAMS/CONOPT y GAMS/MINOS y comparan además los resultados obtenidos por medio del algoritmo propuesto con los que se obtienen con el resolutor de optimización global determinista GAMS/BARON. Se abordaron 9 problemas de la literatura y en todos los casos se obtienen las mismas soluciones determinadas por BARON en el límite de tiempo establecido, 3600s, sin embargo no logra probarse optimalidad global para todos los problemas.

Castro y col. (2009) utilizan también una superestructura de red simplificada, para evitar los términos bilineales que aparecen en los divisores posteriores a las unidades de tratamiento en la formulación de PNL utilizada, los autores proponen la optimización individual de cada unidad de tratamiento, que puede formularse con un modelo de PL. El enfoque de solución consta de dos etapas, en la primera se resuelven problemas de PL para cada una de las unidades de manera sucesiva para un arreglo dado

de las unidades de tratamiento, en la segunda, la solución del problema de PL es utilizada como punto de arranque del modelo de PNL. Se consideran todos los arreglos en serie posibles para las unidades de tratamiento, el algoritmo se repite para cada secuencia y cada solución obtenida en la primera etapa corresponde a un punto de arranque. Con este enfoque se resuelven 9 problemas de la literatura con CPLEX y CONOPT como resolutores de PL y PNL respectivamente.

Galán y Grossmann (2011) señalaron que tanto la metodología del punto de pliegue como los métodos de programación matemática suelen representar los contaminantes y los procesos de tratamiento de manera idealizada, lo que dificulta su aplicación a problemas industriales del mundo real. En su trabajo buscan el diseño óptimo de una red de tratamiento para los efluentes provenientes de una industria de refinamiento de metales, contaminados con metales pesados, sólidos suspendidos (SS), sales inorgánicas y compuestos orgánicos, algunos de estos susceptibles a tratamiento por métodos biológicos (DBO). Para generar un diseño óptimo se toman en cuenta factores como los costos de capital, de operación y de disposición de residuos, que no son tomados en cuenta en muchos trabajos, que solo buscan minimizar el flujo tratado. Considerando una secuencia establecida, dada por conocimientos de ingeniería y algunas restricciones de concentraciones mínimas y máximas permitidas en las unidades, se seleccionan las tecnologías de tratamiento a instalar de entre varias disponibles y la mejor distribución de flujos, buscando minimizar el costo total del sistema. Los costos de cada tecnología son estimados con base en los documentos de las BREF (“Best Available Techniques Reference”), referencia europea de las mejores tecnologías disponibles y por medio de la optimización de una superestructura de PNL-EM que se resuelve con el resolutor de optimización global determinista GAMS/BARON se determinan las tecnologías de tratamiento más adecuadas y la topología y condiciones de operación que minimizan los costos totales.

Teles y col. (2012) estudiaron la optimización global de redes de uso eficiente de agua y de redes de tratamiento de efluentes haciendo uso de una técnica de desagregación multiparamétrica (Teles y col., 2011), con la que se aproximan los modelos no convexos de PNL originales con modelos de PL-EM. En el caso del modelo empleado por Teles y col., los términos bilineales aparecen en los balances de contaminante en los mezcladores previos a las unidades de tratamiento como el producto de flujos de efluente por concentraciones de contaminante, son remplazados por un conjunto de restricciones lineales en las cuales los flujos son desagregados y las concentraciones parametrizadas.

Recientemente, Ting y col. (2016) retoman el concepto de desagregación paramétrica y proponen un algoritmo de optimización global en dos fases para el diseño de redes de tratamiento de efluentes usando esta herramienta. Dicho algoritmo es comparado con dos resolutores comerciales para los

que se estudiaron brechas de optimalidad y tiempos de cómputo, encontrándose que los resultados son competitivos. Se compara además el desempeño del algoritmo en dos formulaciones del problema similares a las estudiadas en el trabajo de Castro y col. (2007), una con flujos totales y concentraciones como variables y otra con flujos totales, flujos másicos de contaminantes y fracciones de división como variables, dependiendo del caso se generan mejores resultados con una u otra formulación, aunque se concluye de manera general que la formulación de flujos totales y concentraciones resulta más adecuada para este algoritmo. En el estudio se comparan también dos resolvidores de optimización global según su desempeño en la solución de 16 problemas de la literatura, encontrándose que GloMIQO muestra un mejor desempeño que BARON. Se comparan también relajaciones de PL con relajaciones de PL-EM.

Como señalan Statyukha y col. (2008), muchas industrias de tamaño medio cuentan con sistemas de tratamiento de efluentes en operación, por lo que están más interesadas en métodos de reconfiguración que de síntesis, debido a esto varios autores han empezado a abordar este tema.

Hernández Suárez y col. (2008) estudiaron la reconfiguración óptima de sistemas de tratamiento de una unidad con la finalidad de adaptar sistemas de tratamiento en operación para cumplir con especificaciones de descarga más estrictas cuando las legislaciones ambientales cambian. Se propone un modelo de PNL que contempla una corriente de recicló en la unidad; por medio del modelo se analiza la optimalidad de sistemas de tratamiento en operación y la posible reconfiguración de éstos cuando cambian las especificaciones de descarga. El modelo de PNL se resuelve usando como punto de arranque la solución de una formulación de PL generada al volver constantes los valores de las fracciones de división, que generan los términos bilineales en el modelo original. Para asegurar una exploración adecuada de la región factible se realiza un barrido sobre los valores de las fracciones de división y para cada par de valores se resuelve la formulación de PL seguida de la formulación de PNL. El método es sencillo y en algunos casos permite identificar modificaciones que pueden hacerse para disminuir costos en sistemas de tratamiento de una unidad cuando estos ya se encuentran en operación o reconfigurarlos para cumplir con nuevas especificaciones de descarga sin necesidad de invertir en nuevas tecnologías; en el problema abordado en el trabajo se logra una reducción de costos en relación al caso base y cuando las especificaciones de descarga se vuelven más estrictas se consigue reconfigurar el diseño base para alcanzar factibilidad sin necesidad de incluir nuevas unidades de tratamiento. Esto en ambos casos es posible al incluir una corriente de recicló en la unidad, lo cual pone en evidencia que, si bien las corrientes de recicló incrementan el flujo tratado en

las unidades, es importante considerarlas en el diseño de sistemas de tratamiento, pues en algunos casos depende de ello conseguir factibilidad o diseños más económicos.

Sueviriyan y col. (2016) abordan el problema de reconfiguración para sistemas con múltiples unidades de tratamiento, resolviendo modelos de PNL-EM a partir de relajaciones de PL-EM usando ciclos en algunas unidades.

Aunque la reconfiguración de sistemas de tratamiento está fuera del alcance de este trabajo, los trabajos de Hernández-Suárez y col. (2008) y Sueviriyan y col. (2016) dan evidencia de la importancia de considerar las corrientes de reciclaje en las unidades de tratamiento para, en algunos casos, poder conseguir factibilidad o bien reducción de costos. Li y col. (2016) señalaron también la importancia de la inclusión de corrientes de reciclaje para poder cumplir con restricciones de máxima concentración permitida a la entrada de las unidades.

### **2.3 Métodos híbridos**

A pesar de las limitaciones de la metodología del punto de pliegue, algunos autores usan como base los conceptos y procedimientos de ésta en combinación con la programación matemática u otras técnicas para generar diseños de sistemas de tratamiento distribuido de manera sencilla.

Zamora-Mata y col. (2004) señalaron que los sistemas de tratamiento de efluentes con una unidad de tratamiento sin reciclaje pueden optimizarse de manera rigurosa resolviendo un solo problema de PL. Los autores proponen un modelo para ser utilizado en el contexto de la metodología del punto de pliegue para sistemas multicontaminante, el cual permite resolver de manera simultánea los pasos de determinación de metas de flujo mínimo de efluente a tratar y el diseño de una subred de tratamiento de efluentes. Cada unidad de tratamiento se considera como una subred de tratamiento, parte de un sistema con múltiples unidades, la secuencia de las unidades puede determinarse de acuerdo a la propuesta de Kuo y Smith (1997) de minimización de degradación de efluentes por mezclado y la subred de tratamiento de efluentes para cada unidad es optimizada individualmente. De esta manera cada subred de tratamiento es optimizada de manera sencilla y rigurosa, sin embargo los sistemas con ciclos son excluidos de la región de búsqueda.

Statyukha y col. (2008) propusieron otro enfoque de diseño híbrido, en el cual el análisis del punto de pliegue y el concepto de degradación de efluentes se emplean para desarrollar una estructura inicial, con base en la cual se crea una superestructura más sencilla que la superestructura general, que se resuelve como un problema de PNL. La metodología permite que el usuario tenga control en

el desarrollo del diseño, estableciendo en la superestructura conexiones obligatorias o prohibidas, de acuerdo a su conocimiento del proceso y bajo ciertas condiciones el método puede usarse también para reconfiguración de sistemas en operación, la metodología es aplicada con éxito en la reducción de costos en reconfiguración de sistemas de tratamiento de efluentes provenientes de galvanoplastia, una granja y una empacadora de carne.

---

## Capítulo 3

# MODELO PNL-R

---

### 3.1 Introducción

Cuando se aborda un problema de optimización, las características del modelo utilizado para representar y tratar matemáticamente el problema tienen un papel muy importante en la obtención de una buena solución. Al formular un modelo debe buscarse un equilibrio entre tratabilidad matemática y una representación realista del problema que se aborda, de manera que puedan obtenerse resultados útiles. Generalmente un mismo problema puede formularse de distintas maneras, que si bien son matemáticamente equivalentes, pueden tener diferente nivel de dificultad para los algoritmos de solución y en ocasiones la calidad de la solución obtenida por un algoritmo de optimización depende de las características del modelo matemático, como linealidad, diferenciabilidad, cotas de las variables, etc. (Bazaraa y col. 2006).

Para abordar el problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes, en la literatura se han propuesto algunas formulaciones de PNL que representan matemáticamente la superestructura de red introducida en el Capítulo 1, que se muestra en la Fig. 3.1. También han sido propuestas formulaciones de PNL-EM para abordar problemas en los que debe elegirse entre dos o más tecnologías de tratamiento distintas para remover un mismo contaminante o grupo de contaminantes. Todos estos modelos incluyen términos bilineales, que resultan de los balances de materia en mezcladores o divisores, dependiendo del tipo de formulación que se utilice, generando modelos de optimización no convexos.

En este trabajo se desarrolla un modelo de PNL para la síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes que aborda el problema planteado formalmente en la Sección 1.3.1 con las suposiciones de trabajo descritas en esa sección. El modelo, denominado modelo PNL-R, es un modelo general que permite modelar una superestructura de red con ciclos y recirculaciones y permite abordar problemas con distintas cantidades de contaminantes, corrientes y unidades de tratamiento (UT) establecidas con tasas de remoción constantes y permite también incorporar algunas restricciones de proceso. En la Tabla 3.1 se muestran algunas características del modelo PNL-R y de otros modelos previos de la literatura.

Tabla 3.1 Características de modelos de PNL de la literatura para problemas de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes y del modelo PNL-R.

Autores del modelo	Superestructura	Variables del modelo	Ecuaciones en que aparecen términos bilineales
Galán y Grossmann (1998)	Superestructura de Galán y Grossmann (1998)	Flujos másicos totales, flujos másicos de contaminante y fracciones de división	Balances de materia en divisores
Hernández-Suárez y col. (2004)	Superestructura con flujo hacia adelante (sin reciclos o recirculaciones)	Flujos másicos totales, carga másica removida por UT, fracciones de división y concentraciones de contaminante en el punto de descarga	Balances de materia en mezcladores y en UT
Martín-Sistac y Graells (2005)	Superestructura de Galán y Grossmann (1998)	Flujos másicos totales, flujos másicos de contaminante, fracciones de división	Balances de materia en mezcladores
Castro y col. (2007)	Superestructura de Galán y Grossmann (1998)	Flujos másicos totales y concentraciones	Balances de materia en mezcladores
Modelo PNL-R	Superestructura de Galán y Grossmann (1998)	Flujos másicos totales, flujos másicos de contaminante, fracciones de división y concentraciones de contaminante en el punto de descarga	Balances de materia en divisores que preceden a las UT

Las principales diferencias entre los modelos de la Tabla 3.1 radican en las variables utilizadas para representar las condiciones de operación en los puntos intermedios del sistema; mientras que en todos los modelos se utilizan flujos másicos totales como variables para la formulación de la superestructura de red, algunos de los autores emplean concentraciones de contaminante y otros emplean flujos másicos de contaminante y fracciones de división en los balances de contaminante. Las variables utilizadas para formular un modelo influyen en la generación de términos bilineales en las ecuaciones que modelan distintos puntos del sistema. Dependiendo del algoritmo utilizado, pueden obtenerse mejores resultados con algún modelo en comparación con otros con distinta estructura y la efectividad del modelo puede depender incluso de la instancia abordada (ver por



ejemplo Castro y col., 2007). Una potencial ventaja de los modelos que emplean flujos máxicos de contaminante y fracciones de división, como el propuesto en este trabajo, es que el dominio de las variables de fracciones de división es más pequeño que el dominio de los flujos máxicos o las concentraciones, permitiendo generar mejores relajaciones lineales, lo que puede influenciar la rapidez de algunos algoritmos de optimización como GAMS/BARON, pues la brecha de optimalidad se reduce rápidamente (Castro y col., 2007).

El modelo desarrollado en este trabajo es una extensión del modelo propuesto en la tesis doctoral de Hernández-Suárez (2004), en el cual la superestructura modelada no incluye corrientes de recirculación o reciclado. Al igual que en el modelo propuesto por Galán y Grossmann (1998), los flujos totales, los flujos máxicos de contaminante y las fracciones de división son variables del modelo, sin embargo en la formulación de Galán y Grossmann se generan términos bilineales en todos los divisores del sistema, mientras que en el modelo propuesto se generan menos términos bilineales, los cuales aparecen solo en los divisores después de las UT. Recientemente Ting y col. (2016) propusieron un modelo similar al que aquí se propone, con algunas diferencias en la formulación del mezclador de la corriente de descarga.

En este capítulo se describe el modelo desarrollado, que se valida por medio de su aplicación a cuatro problemas de la literatura, resueltos empleando el algoritmo de multi-arranque estocástico propuesto en este trabajo, que se describe en el Capítulo 4. Los problemas resueltos tienen distinto número de contaminantes, corrientes, unidades de tratamiento y en algunos casos restricciones de proceso y para todos se reproducen las mejores soluciones reportadas en la literatura. Los problemas se muestran como ejemplos ilustrativos de la aplicación del modelo en la Sección 3.4, para los dos primeros se muestra la formulación del caso particular abordado con el modelo PNL-R.

#### **3.2 Descripción del modelo PNL-R**

El modelo PNL-R está compuesto por parámetros, variables y las ecuaciones que los relacionan. Los parámetros son característicos de cada problema: los flujos y concentraciones en las corrientes efluentes que ingresan al sistema para ser tratadas, las tasas de remoción y costos de capital y operación de las unidades de tratamiento y las especificaciones de descarga. Las variables representan la topología y condiciones de operación del sistema y son las concentraciones en el punto de descarga, los flujos máxicos intermedios de efluente y de cada uno de los contaminantes en

distintos puntos del sistema y las variables fraccionales, que representan la distribución de flujo entre las UT y la descarga y permiten mantener una relación proporcional entre flujos máscicos de efluente y de contaminante enviados desde una unidad de tratamiento a las otras unidades y la descarga al incorporarse a algunas expresiones adicionales que dan consistencia al modelo.

Las ecuaciones del modelo son la función objetivo y las restricciones. La función objetivo planteada en este modelo expresa el costo total anual del sistema, los costos del sistema están relacionados con el flujo efluente tratado por medio de coeficientes de costos de capital y operación en forma lineal o no lineal, dependiendo del problema abordado, esta función permite abordar también el problema de minimización de flujo total tratado. Comúnmente en la literatura se asume que los costos de un sistema de tratamiento son proporcionales al flujo total tratado en éste, lo cual es adecuado en muchos casos, como señalaron McLaughlin y col. (1992) los costos de operación de una unidad de tratamiento están relacionados con el volumen de efluente tratado y comúnmente aumentan también si la concentración de los contaminantes a ser tratados es baja, sin embargo, es importante tener en cuenta que el CTA no siempre disminuye de forma proporcional al flujo tratado. Cuando los costos de capital dominan fuertemente sobre los costos de operación, los diseños que minimizan flujo total tratado suelen ser costosos (Hidalgo-Muñoz, 2016), en otros casos por ejemplo, se cuenta con varias UT que remueven un mismo contaminante o grupo de contaminantes y al aumentar el flujo tratado en las unidades con más altas tasas de remoción puede reducirse el flujo total tratado en el sistema, pero si estas tienen un costo muy elevado con respecto a las otras unidades los costos se elevarán en comparación con otros diseños.

Considerando las suposiciones de trabajo: no hay pérdida de agua residual en los procesos de tratamiento y las tasas de remoción de las unidades permanecen constantes en el rango de operación, se realizan balances de materia para los efluentes y para los contaminantes en mezcladores, divisores y las UT, estos balances constituyen las restricciones del modelo, junto con las especificaciones de descarga y restricciones de proceso adicionales que se presentan en algunos casos, como por ejemplo flujos o concentraciones máximas permitidas en la entrada o concentraciones fijas en la salida de las unidades de tratamiento. Los puntos negros de la Fig. 3.1 representan los divisores del sistema, cada corriente efluente que recién ingresa al sistema o que sale de una UT puede ser enviada desde un divisor a la descarga y/o a una o varias de las otras unidades. En los mezcladores, representados con puntos blancos, se unen todas las corrientes que van a tratarse en una unidad de tratamiento, o bien, las corrientes enviadas al punto de descarga. En

las UT se hacen balances de materia que relacionan los flujos másicos de contaminante que entran y salen de cada unidad con base en las tasas de remoción de cada una de éstas. Además de las restricciones se incluyen expresiones para el cálculo de cotas de cada una de las variables, las cuales fueron establecidas por inspección física y resultan útiles para lograr la convergencia de los algoritmos de optimización y son indispensables para inicializar el algoritmo que se propone en este trabajo.

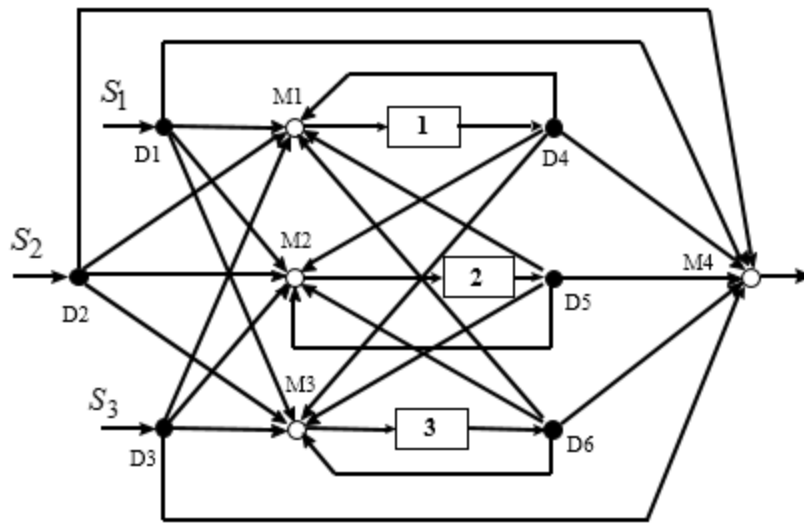


Fig. 3.1 Ejemplo de superestructura de red para un sistema de 3 corrientes y 3 unidades de tratamiento (Hernández-Suárez y col., 2004).

### 3.3 Modelo PNL-R

A continuación se presenta detalladamente el modelo de PNL propuesto en este trabajo.

#### Índices

$i$  = corriente efluente

$j$  = contaminante

$k, l$  = unidad de tratamiento

$e$  = punto de descarga

$U$  = cota superior de una variable

### **Conjuntos**

$I = \{i: i \text{ es una corriente efluente}\}$

$J = \{j: j \text{ es un contaminante}\}$

$K = \{k: k \text{ es una unidad de tratamiento}\}$

### **Parámetros**

$C_{i,j}$  = Concentración de contaminante en una corriente efluente (ppm)

$c_{j,e}^U$  = Concentración máxima de contaminante permitida en el punto de descarga (ppm)

$CC_k$  = Coeficiente de costo de capital asociado a una unidad de tratamiento ( $\$h^{n_k}t^{-n_k}$ )

$CO_k$  = Coeficiente de costo de operación asociado a una unidad de tratamiento ( $\$t^{-p_k}h^{-(1-p_k)}$ )

$R_{j,k}$  = Relación de remoción de contaminante en una unidad de tratamiento

$S_i$  = Flujo de una corriente efluente (t/h)

$F_e$  = Flujo total de efluente en el punto de descarga (t/h)

$$F_e = \sum_{i \in I} S_i.$$

$n_k$  = Exponente de la función de costo asociado a una unidad de tratamiento en relación a los costos de capital

$p_k$  = Exponente de la función de costo asociado a una unidad de tratamiento en relación a los costos de operación

$r$  = Factor de anualización (1/año)

$f$  = Factor de operación (horas/año)

### **Variables positivas continuas**

$c_{j,e}$  = Concentración de contaminante en el punto de descarga (ppm)

$f_{i,e}$  = Flujo desviado al punto de descarga desde un divisor inicial (t/h)

$f_{i,k}$  = Flujo enviado al mezclador que precede una unidad de tratamiento desde un divisor inicial (t/h)

$m_{j,k}$  = Flujo másico de contaminante a la entrada de la unidad de tratamiento (Kg/h)

$\bar{m}_{j,k}$  = Flujo másico de contaminante a la salida de la unidad de tratamiento (Kg/h)

$t_k$  = Flujo de efluente a través de una unidad de tratamiento (t/h)

$t_{\ell,k}$  = Flujo de efluente enviado desde una UT  $\ell$  a la UT  $k$  (t/h)

$t_{k,e}$  = Flujo de efluente enviado al punto de descarga desde una unidad de tratamiento (t/h)

$w_{j,k,e}$  = Flujo másico de contaminante enviado desde una unidad de tratamiento al punto de descarga (Kg/h)

$w_{j,\ell,k}$  = Flujo másico de contaminante enviado desde una UT  $\ell$  a la UT  $k$  (Kg/h)

$\alpha_{\ell,k}$  = Fracción del flujo de salida de la unidad de tratamiento  $\ell$  a la unidad de tratamiento  $k$

$\alpha_{k,e}$  = Fracción del flujo de salida de la unidad de tratamiento  $\ell$  enviado a la descarga

### ***Función Objetivo***

$$\text{Min } z = \sum_{k \in K} (r \cdot CC_k t_k^{n_k} + f \cdot CO_k t_k^{p_k}) \quad (3.1)$$

### ***Restricciones del modelo***

- ***Balances de masa para efluente***

Balances en los divisores iniciales de la red

$$\sum_{k \in K} f_{i,k} + f_{i,e} = S_i \quad i \in I \quad (3.2)$$

Balances en los mezcladores que preceden a las unidades de tratamiento

$$\sum_{i \in I} f_{i,k} + \sum_{\ell \in K} t_{\ell,k} = t_k \quad k \in K \quad (3.3)$$

Balances en los divisores después de las unidades de tratamiento

$$\sum_{\ell \in K} t_{k,\ell} + t_{k,e} = t_k \quad k \in K \quad (3.4)$$

Balance en el mezclador final de la red

$$\sum_{i \in I} f_{i,e} + \sum_{k \in K} t_{k,e} = F_e \quad (3.5)$$

- **Balances de masa para contaminante**

Balances en mezcladores que preceden las unidades de tratamiento

$$10^{-3} \sum_{i \in I} f_{i,k} C_{i,j} + \sum_{\ell \in K} w_{j,\ell,k} = m_{j,k} \quad j \in J \quad k \in K, \quad (3.6)$$

Balances en divisores después de las unidades de tratamiento

$$\sum_{\ell \in K} w_{j,k,\ell} + w_{j,k,e} = \bar{m}_{j,k} \quad j \in J, \quad k \in K \quad (3.7)$$

Balance en el mezclador final de la red

$$10^{-3} \sum_{i \in I} f_{i,e} C_{i,j} + \sum_{k \in K} w_{j,k,e} = 10^{-3} F_e c_{j,e} \quad j \in J \quad (3.8)$$

Remoción de contaminantes en las unidades de tratamiento

$$\bar{m}_{j,k} = (1 - R_{j,k}) m_{j,k} \quad j \in J, \quad k \in K \quad (3.9)$$

- **Relaciones de las fracciones de división**

Condición para que las corrientes que salen de los divisores después de las unidades de tratamiento tengan las mismas relaciones de flujo másico para cada contaminante.

$$w_{j,k,\ell} = \alpha_{k,\ell} \bar{m}_{j,k} \quad j \in J, \quad k, \ell \in K \quad (3.10)$$

$$w_{j,k,e} = \alpha_{k,e} \bar{m}_{j,k} \quad j \in J, \quad k \in K \quad (3.11)$$

Las variables fraccionales también son usadas para distribuir el flujo total en los divisores después de las unidades de tratamiento. Las relaciones de flujo total deben ser las mismas que las de flujo másico de contaminante para cada corriente que sale de un divisor.

$$t_{k,\ell} = \alpha_{k,\ell} t_k \quad k, \ell \in K \quad (3.12)$$

$$t_{k,e} = \alpha_{k,e} t_k \quad k \in K \quad (3.13)$$

Donde:

$$\sum_{\ell \in K} \alpha_{k,\ell} + \alpha_{k,e} = 1 \quad k \in K \quad (3.14)$$

**Cotas**

$$0 \leq \alpha_{k,\ell}, \alpha_{k,e} \leq 1 \quad k, \ell \in K \quad (3.15)$$

$$0 \leq c_{j,e} \leq c_{j,e}^U \quad j \in J \quad (3.16)$$

$$0 \leq f_{i,k}, f_{i,e} \leq S_i \quad i \in I, k \in K \quad (3.17)$$

$$0 \leq \bar{m}_{j,k} \leq m_{j,k} \leq m_{j,k}^U \quad j \in J, k \in K \quad (3.18)$$

$$0 \leq w_{j,\ell,k}, w_{j,k,e} \leq m_{j,k}^U \quad j \in J, \ell, k \in K \quad (3.19)$$

$$0 \leq t_k \leq t_k^U \quad k \in K \quad (3.20)$$

$$0 \leq t_{\ell,k}, t_{k,e} \leq t_k^U \quad \ell, k \in K \quad (3.21)$$

**Notas**

- 1) La cota superior para el flujo máximo a tratar en las UT,  $t_k^U$ , se ve afectada por la existencia de corrientes de reciclo en cada unidad y por las recirculaciones del sistema. De acuerdo a la capacidad máxima de la UT u otras consideraciones prácticas deberá establecerse el valor de esta cota, se sugiere establecerlo en forma proporcional al flujo total de efluente que ingresa al sistema,  $F_e$ , que en el caso de ausencia de reciclos y recirculaciones es la cota superior, multiplicando por una constante  $C$ .

$$t_k^U = CF_e \quad (3.22)$$

En este trabajo el valor  $C=3$  fue suficiente para reproducir todas las soluciones con corrientes de reciclo reportadas en la literatura, debe tenerse en cuenta también que corrientes de recirculación o reciclo con flujos muy grandes pueden ser poco realistas.

- 2) El flujo másico total de contaminante  $j$  en la entrada del sistema de tratamiento,  $m_j^U$ , está dado por:

$$10^3 m_j^U = \sum_{i \in I} S_i C_{i,j} \quad j \in J \quad (3.23)$$

- 3) En caso de no existir una restricción para el máximo flujo másico de contaminante a la entrada de la UT,  $m_{j,k}^U$ , ésta se fija según la relación establecida para el flujo máximo tratado en la UT como:

$$m_{j,k}^U = C * m_j^U \quad (3.24)$$

- 4) La carga másica mínima de contaminante  $j$  que deberá ser removida por el sistema de tratamiento,  $\Delta m_j^L$ , puede ser obtenida por medio de la siguiente expresión:

$$10^3 \Delta m_j^L = \sum_{i \in I} S_i C_{i,j} - \sum_{i \in I} S_i c_{j,e}^U \quad j \in J \quad (3.25)$$

- 5) Una cota superior para la concentración de un contaminante  $j$  en la entrada de una unidad de tratamiento  $k$ ,  $Cin_{j,k}^U$  se puede establecer con la siguiente desigualdad lineal:

$$10^3 m_{j,k} - Cin_{j,k}^U t_k \leq 0 \quad j \in J, \quad k \in K \quad (3.26)$$

De manera similar una concentración mínima de contaminante permitida en la unidad de tratamiento,  $Cin_{j,k}^L$ , se puede establecer con la siguiente desigualdad lineal:

$$10^3 m_{j,k} - Cin_{j,k}^L t_k \geq 0 \quad j \in J, \quad k \in K \quad (3.27)$$

- 6) Un requerimiento de fijar la concentración de un contaminante  $j$  en la salida de una unidad de tratamiento  $k$ ,  $Cout_{j,k}^T$ , se puede establecer con la siguiente desigualdad lineal:

$$10^3 (1 - R_{j,k}) m_{j,k} - Cout_{j,k}^T t_k \leq 0 \quad j \in J, \quad k \in K \quad (3.28)$$

- 7) Una cota superior para la carga másica removida de un contaminante  $j$ ,  $\Delta m_{j,k}^U$ , en una unidad de tratamiento  $k$ , se puede establecer con la desigualdad lineal siguiente:



$$R_{j,k}m_{j,k} - \Delta m_{j,k}^U \leq 0 \quad j \in J, \quad k \in K \quad (3.29)$$

Donde:

$$\sum_{k \in K} \Delta m_{j,k}^U \geq \Delta m_j^L \quad j \in J \quad (3.30)$$

### 3.4 Ejemplos Ilustrativos

Para ilustrar el uso del modelo PNL-R en la formulación de problemas de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes se resuelven y discuten a continuación cuatro de los problemas de la literatura abordados en este trabajo, con los que además se valida el modelo, obteniendo soluciones reportadas previamente por otros autores con distintas formulaciones y metodologías de solución. Para resolver los problemas se utiliza el algoritmo de multi-arranque estocástico que se describe en el Capítulo 4 implementando 1000 iteraciones en el sistema GAMS 21.6.

#### 3.4.1 Ejemplo Ilustrativo 3.1

Este problema fue propuesto por Zamora-Mata y col. (2004), quienes lo resuelven por medio de la solución de un solo problema de PL utilizando un método híbrido, descrito en el Capítulo 2. El método combina el concepto de degradación de efluentes introducido por Kuo y Smith (1997) con el uso de PL, excluyendo las estructuras con reciclos del espacio de soluciones factibles.

Cinco corrientes efluentes se encuentran contaminadas con los contaminantes A, B y C, los datos de las corrientes se muestran en la Tabla 3.2. Se dispone de una única unidad de tratamiento con las tasas de remoción que se muestran en la Tabla 3.3, los efluentes deben tratarse total o parcialmente en la unidad de manera que en el punto de descarga los tres contaminantes cumplan con los límites ambientales permitidos.

Tabla 3.2 Datos de las corrientes efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.1.

Corriente No.	Flujo (t/h)	Concentración de contaminante		
		A (ppm)	B (ppm)	C (ppm)
1	10	930	300	400
2	38	350	0	150
3	25	200	700	350
4	12	0	350	300
5	30	700	150	900

Tabla 3.3 Datos de la unidad de tratamiento y límites ambientales permitidos en la descarga en el Ejemplo Ilustrativo 3.1.

Contaminante	Relación de remoción en UT (%)	Límite ambiental permitido (ppm)
A	95	60
B	85	50
C	90	70

Además, por bases de diseño el sistema de tratamiento debe satisfacer las siguientes restricciones:

- i) El contaminante C debe tener una concentración fija de 45 ppm a la salida de la unidad de tratamiento.
- ii) El contaminante A debe tener una concentración de a lo más 430 ppm a la entrada de la unidad de tratamiento.
- iii) El proceso de remoción exige que el flujo de la corriente 4 sea al menos un tercio del flujo de la corriente 3 en la corriente de mezclado que entra a la unidad de tratamiento.

Los costos de la unidad de tratamiento están en función del flujo tratado,  $t$  (t/h). El costo de capital (\$) se determina como  $10,300t$  y el costo de operación (\$/t) como  $0.0022t$ . Se considera una tasa anual de retorno de 10% y aproximadamente 3822 h anuales de operación de la planta.

El diseño de menor costo para este problema se obtiene al optimizar la superestructura de red mostrada en la Fig. 3.2.

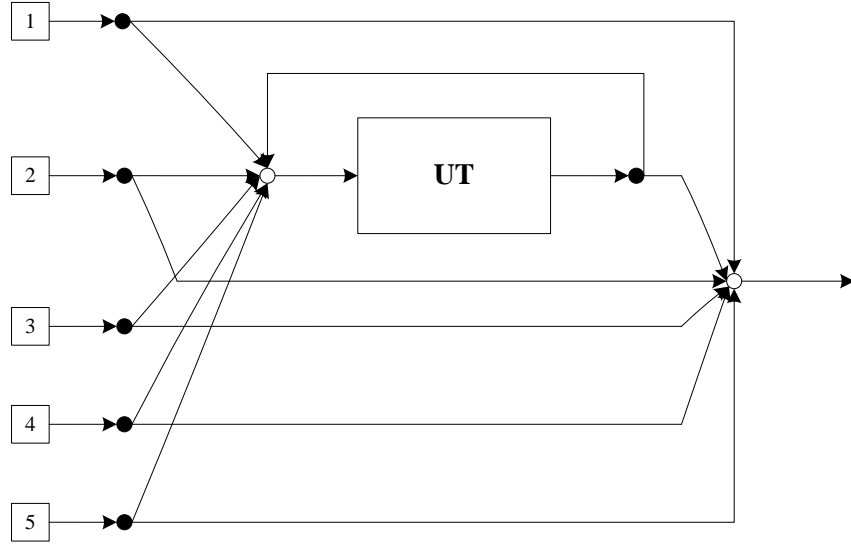


Fig. 3.2 Superestructura de red a optimizar en el Ejemplo Ilustrativo 3.1.

El modelo PNL-R para esta superestructura y este problema se formula de la siguiente manera:

Función Objetivo:

$$\text{Min} \quad z = 0.10 \cdot 10300t_1 + 8322 \cdot 0.0022t_1 \quad (3.31)$$

Restricciones del modelo

Balances de efluente en los divisores iniciales de la red (5 ecuaciones):

$$\begin{aligned} f_{1,1} + f_{1,e} &= S_1 \\ f_{2,1} + f_{2,e} &= S_2 \\ f_{3,1} + f_{3,e} &= S_3 \\ f_{4,1} + f_{4,e} &= S_4 \\ f_{5,1} + f_{5,e} &= S_5 \end{aligned} \quad (3.32)$$

Balances de efluente en el mezclador que precede a la unidad de tratamiento (1 ecuación):

$$(f_{1,1} + f_{2,1} + f_{3,1} + f_{4,1} + f_{5,1}) + t_{1,1} = t_1 \quad (3.33)$$

Balance de efluente en el divisor después de la UT (1 ecuación):

$$t_{1,1} + t_{1,e} = t_1 \quad (3.34)$$

Balance de efluente en el mezclador final de la red (1 ecuación):

$$(f_{1,e} + f_{2,e} + f_{3,e} + f_{4,e} + f_{5,e}) + t_{1,e} = F_e \quad (3.35)$$

Balances de contaminante en el mezclador que precede a la unidad de tratamiento (3 ecuaciones):

$$\begin{aligned} 10^{-3}(f_{1,1}C_{1,A} + f_{2,1}C_{2,A} + f_{3,1}C_{3,A} + f_{4,1}C_{4,A} + f_{5,1}C_{5,A}) + w_{A,1,1} &= m_{A,1} \\ 10^{-3}(f_{1,1}C_{1,B} + f_{2,1}C_{2,B} + f_{3,1}C_{3,B} + f_{4,1}C_{4,B} + f_{5,1}C_{5,B}) + w_{B,1,1} &= m_{B,1} \\ 10^{-3}(f_{1,1}C_{1,C} + f_{2,1}C_{2,C} + f_{3,1}C_{3,C} + f_{4,1}C_{4,C} + f_{5,1}C_{5,C}) + w_{C,1,1} &= m_{C,1} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Balances de contaminante en el divisor después de la UT (3 ecuaciones):

$$\begin{aligned} w_{A,1,1} + w_{A,1,e} &= \overline{m}_{A,1} \\ w_{B,1,1} + w_{B,1,e} &= \overline{m}_{B,1} \\ w_{C,1,1} + w_{C,1,e} &= \overline{m}_{C,1} \end{aligned} \quad (3.37)$$

Balances de contaminante en el mezclador final de la red (3 ecuaciones):

$$\begin{aligned} 10^{-3}(f_{1,e}C_{1,A} + f_{2,e}C_{2,A} + f_{3,e}C_{3,A} + f_{4,e}C_{4,A} + f_{5,e}C_{5,A}) + w_{A,1,e} &= 10^{-3}F_e c_{A,e} \\ 10^{-3}(f_{1,e}C_{1,B} + f_{2,e}C_{2,B} + f_{3,e}C_{3,B} + f_{4,e}C_{4,B} + f_{5,e}C_{5,B}) + w_{B,1,e} &= 10^{-3}F_e c_{B,e} \\ 10^{-3}(f_{1,e}C_{1,C} + f_{2,e}C_{2,C} + f_{3,e}C_{3,C} + f_{4,e}C_{4,C} + f_{5,e}C_{5,C}) + w_{C,1,e} &= 10^{-3}F_e c_{C,e} \end{aligned} \quad (3.38)$$

Remoción de contaminantes en la UT (3 ecuaciones):

$$\begin{aligned} \overline{m}_{A,1} &= (1 - R_{A,1})m_{A,1} \\ \overline{m}_{B,1} &= (1 - R_{B,1})m_{B,1} \\ \overline{m}_{C,1} &= (1 - R_{C,1})m_{C,1} \end{aligned} \quad (3.39)$$

Relaciones de las fracciones de división de la UT para los flujos másicos de contaminante (6 ecuaciones):

$$\begin{aligned} w_{A,1,1} &= \alpha_{1,1}\overline{m}_{A,1} \\ w_{B,1,1} &= \alpha_{1,1}\overline{m}_{B,1} \\ w_{C,1,1} &= \alpha_{1,1}\overline{m}_{C,1} \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} w_{A,1,e} &= \alpha_{1,e}\overline{m}_{A,1} \\ w_{B,1,e} &= \alpha_{1,e}\overline{m}_{B,1} \\ w_{C,1,e} &= \alpha_{1,e}\overline{m}_{C,1} \end{aligned} \quad (3.41)$$

Relaciones de las fracciones de división de la UT para los flujos de efluente (2 ecuaciones)

$$t_{1,1} = \alpha_{1,1}t_1 \quad (3.42)$$

$$t_{1,e} = \alpha_{1,e}t_1 \quad (3.43)$$

Donde (1 ecuación):

$$\alpha_{1,1} + \alpha_{1,e} = 1 \quad (3.44)$$

Restricciones Particulares de proceso (3 ecuaciones):

$$\text{i) } 10^{-3}(1-R_{C,1})m_{C,1}-cout_{C,1}^T t_1 \leq 0 \quad (3.45)$$

Donde:

$$cout_{C,1}^T = 45$$

$$\text{ii) } 10^3 m_{A,1} - cin_{A,1}^U \leq 0 \quad (3.46)$$

Donde:

$$cin_{A,1}^U = 430$$

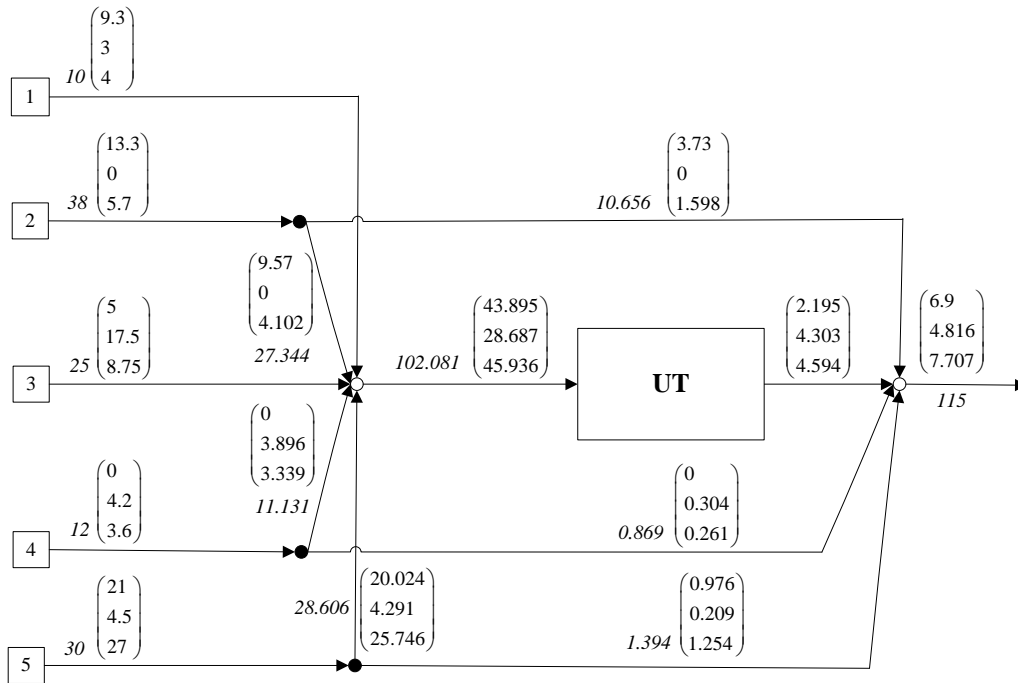
$$\text{iii) } 3f_{4,1} - f_{3,1} \geq 0 \quad (3.47)$$

Donde:

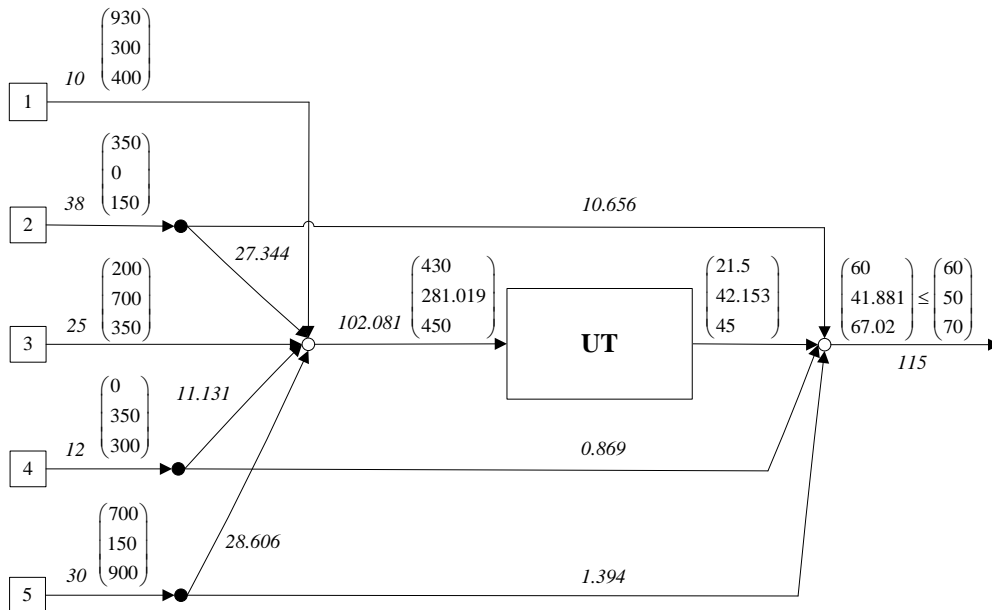
$$cin_{A,1}^U = 430$$

Al resolver esta formulación (expresiones 3.31 a la 3.47) se obtuvieron 75 soluciones óptimas locales distintas, con diferentes estructuras, todas con un costo total anual (CTA) de 107012.14 \$/año, que es aparentemente la solución óptima global, de entre los diseños obtenidos se eligió el que, con el mismo CTA que los otros, genera una corriente de descarga con menores concentraciones para los tres contaminantes y que, por lo tanto causaría un menor impacto al medio ambiente. El diseño seleccionado es el mismo reportado por Zamora-Mata y col.(2004) y se muestra en la Fig. 3.3., solo las corrientes 1 y 3 se tratan completamente y no hay reciclo en la unidad. Como se observa en la Fig. 3.3-b, el sistema de tratamiento cumple con las restricciones de proceso impuestas, el contaminante C tiene una concentración de 45 ppm a la salida de la unidad de tratamiento, la corriente de mezclado que ingresa a la unidad tiene una concentración de A de 430 ppm y las corrientes 3 y 4 mantienen la siguiente relación:

$$\frac{f_{4,1}}{f_{3,1}} = 0.407 \geq \frac{1}{3}.$$



a) Se muestran los vectores de flujos másicos de contaminante en las corrientes



b) Se muestran los vectores de concentraciones de los contaminantes en las corrientes

Fig 3.3 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.1, con un CTA de \$107,012.14. Se indican los flujos de efluente (t/h) en cursivas y a) los vectores de flujos másicos (kg/h), que son las variables de este modelo, y b) los vectores de concentraciones (ppm), respectivamente, con fuente normal.

### 3.4.2 Ejemplo Ilustrativo 3.2

Este problema fue propuesto por Kuo y Smith (1997), quienes lo resuelven usando los principios de la metodología del punto de pliegue y el concepto de degradación de efluentes que proponen en su trabajo.

Tres corrientes efluentes contaminadas con los contaminantes A, B y C, cuyos flujos y concentraciones se muestran en la Tabla 3.4 deben tratarse para cumplir con la especificación de descarga de 100 ppm para cada uno de los contaminantes. Se dispone de tres unidades de tratamiento, cada una remueve uno de los contaminantes según las tasas de remoción mostradas en la Tabla 3.5. Se asume que los costos del sistema son proporcionales al flujo total tratado.

Zamora y Grossmann (1998) aplicaron un algoritmo riguroso de optimización global y probaron que, para este problema, en la solución óptima global el flujo total tratado es 80.779 t/h. El problema ha sido también abordado con distintas metodologías conceptuales y de optimización por Galán y Grossmann (1998), Zamora-Mata y col. (2004), Castro y col. (2007), Shi y Li (2011), Li y col. (2015), Ting y col. (2016) y Liu y col. (2016).

Tabla 3.4 Datos de las corrientes efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.2.

Corriente No.	Flujo (t/h)	Contaminante		
		A (ppm)	B (ppm)	C (ppm)
1	20	600	500	500
2	15	400	200	100
3	5	200	1000	200

Tabla 3.5 Datos de la unidad de tratamiento del Ejemplo Ilustrativo 3. 2.

Proceso No.	Relación de remoción de los contaminantes (%)		
	A	B	C
I	90	0	0
II	0	99	0
III	0	0	80

La superestructura a optimizar en este problema tiene tres corrientes y tres unidades de tratamiento, correspondiendo con la de la Fig. 3.1. El modelo PNL-R para esta superestructura y este problema se formula de la siguiente manera:

Función Objetivo:

$$z = t_1 + t_2 + t_3 \quad (3.48)$$

Restricciones del modelo

Balances de efluente en los divisores iniciales de la red (3 ecuaciones):

$$\begin{aligned} (f_{1,1} + f_{1,2} + f_{1,3}) + f_{1,e} &= S_1 \\ (f_{2,1} + f_{2,2} + f_{2,3}) + f_{2,e} &= S_2 \\ (f_{3,1} + f_{3,2} + f_{3,3}) + f_{3,e} &= S_3 \end{aligned} \quad (3.49)$$

Balances de efluente en los mezcladores que preceden a las unidades de tratamiento (3 ecuaciones):

$$\begin{aligned} (f_{1,1} + f_{2,1} + f_{3,1}) + (t_{1,1} + t_{2,1} + t_{3,1}) &= t_1 \\ (f_{1,2} + f_{2,2} + f_{3,2}) + (t_{1,2} + t_{2,2} + t_{3,2}) &= t_2 \\ (f_{1,3} + f_{2,3} + f_{3,3}) + (t_{1,3} + t_{2,3} + t_{3,3}) &= t_3 \end{aligned} \quad (3.50)$$

Balances de efluente en los divisores después de las unidades de tratamiento (3 ecuaciones):

$$\begin{aligned} (t_{1,1} + t_{1,2} + t_{1,3}) + t_{1,e} &= t_1 \\ (t_{2,1} + t_{2,2} + t_{2,3}) + t_{2,e} &= t_2 \\ (t_{3,1} + t_{3,2} + t_{3,3}) + t_{3,e} &= t_3 \end{aligned} \quad (3.51)$$

Balances de efluente en el mezclador final de la red (1 ecuación):

$$(f_{1,e} + f_{2,e} + f_{3,e}) + (t_{1,e} + t_{2,e} + t_{3,e}) = F_e \quad (3.52)$$



Balances de contaminante en los mezcladores que preceden a las UT (9 ecuaciones):

Unidad de tratamiento 1

$$\begin{aligned} 10^{-3} (f_{1,1}C_{1,A} + f_{2,1}C_{2,A} + f_{3,1}C_{3,A}) + (w_{A,1,1} + w_{A,2,1} + w_{A,3,1}) &= m_{A,1} \\ 10^{-3} (f_{1,1}C_{1,B} + f_{2,1}C_{2,B} + f_{3,1}C_{3,B}) + (w_{B,1,1} + w_{B,2,1} + w_{B,3,1}) &= m_{B,1} \\ 10^{-3} (f_{1,1}C_{1,C} + f_{2,1}C_{2,C} + f_{3,1}C_{3,C}) + (w_{C,1,1} + w_{C,2,1} + w_{C,3,1}) &= m_{C,1} \end{aligned} \quad (3.53)$$

Unidad de tratamiento 2

$$\begin{aligned} 10^{-3} (f_{1,2}C_{1,A} + f_{2,2}C_{2,A} + f_{3,2}C_{3,A}) + (w_{A,1,2} + w_{A,2,2} + w_{A,3,2}) &= m_{A,2} \\ 10^{-3} (f_{1,2}C_{1,B} + f_{2,2}C_{2,B} + f_{3,2}C_{3,B}) + (w_{B,1,2} + w_{B,2,2} + w_{B,3,2}) &= m_{B,2} \\ 10^{-3} (f_{1,2}C_{1,C} + f_{2,2}C_{2,C} + f_{3,2}C_{3,C}) + (w_{C,1,2} + w_{C,2,2} + w_{C,3,2}) &= m_{C,2} \end{aligned} \quad (3.54)$$

Unidad de tratamiento 3

$$\begin{aligned} 10^{-3} (f_{1,3}C_{1,A} + f_{2,3}C_{2,A} + f_{3,3}C_{3,A}) + (w_{A,1,3} + w_{A,2,3} + w_{A,3,3}) &= m_{A,3} \\ 10^{-3} (f_{1,3}C_{1,B} + f_{2,3}C_{2,B} + f_{3,3}C_{3,B}) + (w_{B,1,3} + w_{B,2,3} + w_{B,3,3}) &= m_{B,3} \\ 10^{-3} (f_{1,3}C_{1,C} + f_{2,3}C_{2,C} + f_{3,3}C_{3,C}) + (w_{C,1,3} + w_{C,2,3} + w_{C,3,3}) &= m_{C,3} \end{aligned} \quad (3.55)$$

Balances de contaminante en los divisores después de las UT (9 ecuaciones):

Unidad de tratamiento 1

$$\begin{aligned} (w_{A,1,1} + w_{A,1,2} + w_{A,1,3}) + w_{A,1,e} &= \overline{m}_{A,1} \\ (w_{B,1,1} + w_{B,1,2} + w_{B,1,3}) + w_{B,1,e} &= \overline{m}_{B,1} \\ (w_{C,1,1} + w_{C,1,2} + w_{C,1,3}) + w_{C,1,e} &= \overline{m}_{C,1} \end{aligned} \quad (3.56)$$

Unidad de tratamiento 2

$$\begin{aligned} (w_{A,2,1} + w_{A,2,2} + w_{A,2,3}) + w_{A,2,e} &= \overline{m}_{A,2} \\ (w_{B,2,1} + w_{B,2,2} + w_{B,2,3}) + w_{B,2,e} &= \overline{m}_{B,2} \\ (w_{C,2,1} + w_{C,2,2} + w_{C,2,3}) + w_{C,2,e} &= \overline{m}_{C,2} \end{aligned} \quad (3.57)$$

Unidad de tratamiento 3

$$\begin{aligned} (w_{A,3,1} + w_{A,3,2} + w_{A,3,3}) + w_{A,3,e} &= \overline{m}_{A,3} \\ (w_{B,3,1} + w_{B,3,2} + w_{B,3,3}) + w_{B,3,e} &= \overline{m}_{B,3} \\ (w_{C,3,1} + w_{C,3,2} + w_{C,3,3}) + w_{C,3,e} &= \overline{m}_{C,3} \end{aligned} \quad (3.58)$$

Balances de contaminante en el mezclador final de la red (3 ecuaciones):

$$\begin{aligned} 10^{-3} (f_{1,e} C_{1,A} + f_{2,e} C_{2,A} + f_{3,e} C_{3,A}) + (w_{A,1,e} + w_{A,2,e} + w_{A,3,e}) &= 10^{-3} F_e C_{A,e} \\ 10^{-3} (f_{1,e} C_{1,B} + f_{2,e} C_{2,B} + f_{3,e} C_{3,B}) + (w_{B,1,e} + w_{B,2,e} + w_{B,3,e}) &= 10^{-3} F_e C_{B,e} \\ 10^{-3} (f_{1,e} C_{1,C} + f_{2,e} C_{2,C} + f_{3,e} C_{3,C}) + (w_{C,1,e} + w_{C,2,e} + w_{C,3,e}) &= 10^{-3} F_e C_{C,e} \end{aligned} \quad (3.59)$$

Remoción de contaminantes en las UT (9 ecuaciones):

Unidad de tratamiento 1

$$\begin{aligned}\bar{m}_{A,1} &= (1 - R_{A,1}) m_{A,1} \\ \bar{m}_{B,1} &= (1 - R_{B,1}) m_{B,1} \\ \bar{m}_{C,1} &= (1 - R_{C,1}) m_{C,1}\end{aligned}\tag{3.60}$$

Unidad de tratamiento 2

$$\begin{aligned}\bar{m}_{A,2} &= (1 - R_{A,2}) m_{A,2} \\ \bar{m}_{B,2} &= (1 - R_{B,2}) m_{B,2} \\ \bar{m}_{C,2} &= (1 - R_{C,2}) m_{C,2}\end{aligned}\tag{3.61}$$

Unidad de tratamiento 3

$$\begin{aligned}\bar{m}_{A,3} &= (1 - R_{A,3}) m_{A,3} \\ \bar{m}_{B,3} &= (1 - R_{B,3}) m_{B,3} \\ \bar{m}_{C,3} &= (1 - R_{C,3}) m_{C,3}\end{aligned}\tag{3.62}$$

Relaciones de las fracciones de división de la UT para los flujos másicos de contaminante:

Unidad de tratamiento 1 (12ecuaciones):

A otras UT:

$$\begin{aligned}w_{A,1,1} &= \alpha_{1,1} \bar{m}_{A,1} & w_{B,1,1} &= \alpha_{1,1} \bar{m}_{B,1} & w_{C,1,1} &= \alpha_{1,1} \bar{m}_{C,1} \\ w_{A,1,2} &= \alpha_{1,2} \bar{m}_{A,1} & w_{B,1,2} &= \alpha_{1,2} \bar{m}_{B,1} & w_{C,1,2} &= \alpha_{1,2} \bar{m}_{C,1} \\ w_{A,1,3} &= \alpha_{1,3} \bar{m}_{A,1} & w_{B,1,3} &= \alpha_{1,3} \bar{m}_{B,1} & w_{C,1,3} &= \alpha_{1,3} \bar{m}_{C,1}\end{aligned}\tag{3.63}$$

A la descarga:

$$\begin{aligned}w_{A,1,e} &= \alpha_{1,e} \bar{m}_{A,1} \\ w_{B,1,e} &= \alpha_{1,e} \bar{m}_{B,1} \\ w_{C,1,e} &= \alpha_{1,e} \bar{m}_{C,1}\end{aligned}\tag{3.64}$$

Unidad de tratamiento 2 (12ecuaciones):

A otras UT:

$$\begin{aligned}w_{A,2,1} &= \alpha_{2,1} \bar{m}_{A,2} & w_{B,2,1} &= \alpha_{2,1} \bar{m}_{B,2} & w_{C,2,1} &= \alpha_{2,1} \bar{m}_{C,2} \\ w_{A,2,2} &= \alpha_{2,2} \bar{m}_{A,2} & w_{B,2,2} &= \alpha_{2,2} \bar{m}_{B,2} & w_{C,2,2} &= \alpha_{2,2} \bar{m}_{C,2} \\ w_{A,2,3} &= \alpha_{2,3} \bar{m}_{A,2} & w_{B,2,3} &= \alpha_{2,3} \bar{m}_{B,2} & w_{C,2,3} &= \alpha_{2,3} \bar{m}_{C,2}\end{aligned}\tag{3.65}$$

A la descarga:

$$\begin{aligned} w_{A,2,e} &= \alpha_{2,e} \overline{m}_{A,2} \\ w_{B,2,e} &= \alpha_{2,e} \overline{m}_{B,2} \\ w_{C,2,e} &= \alpha_{2,e} \overline{m}_{C,2} \end{aligned} \quad (3.66)$$

Unidad de tratamiento 3 (12ecuaciones):

A otras UT:

$$\begin{aligned} w_{A,3,1} &= \alpha_{3,1} \overline{m}_{A,3} & w_{B,3,1} &= \alpha_{3,1} \overline{m}_{B,3} & w_{C,3,1} &= \alpha_{3,1} \overline{m}_{C,3} \\ w_{A,3,2} &= \alpha_{3,2} \overline{m}_{A,3} & w_{B,3,2} &= \alpha_{3,2} \overline{m}_{B,3} & w_{C,3,2} &= \alpha_{3,2} \overline{m}_{C,3} \\ w_{A,3,3} &= \alpha_{3,3} \overline{m}_{A,3} & w_{B,3,3} &= \alpha_{3,3} \overline{m}_{B,3} & w_{C,3,3} &= \alpha_{3,3} \overline{m}_{C,3} \end{aligned} \quad (3.67)$$

A la descarga:

$$\begin{aligned} w_{A,3,e} &= \alpha_{1,e} \overline{m}_{A,3} \\ w_{B,3,e} &= \alpha_{1,e} \overline{m}_{B,3} \\ w_{C,3,e} &= \alpha_{1,e} \overline{m}_{C,3} \end{aligned} \quad (3.68)$$

Relaciones de las fracciones de división para los flujos de efluente (12 ecuaciones):

Unidad de tratamiento 1:

$$\begin{aligned} t_{1,1} &= \alpha_{1,1} t_1 \\ t_{1,2} &= \alpha_{1,2} t_1 \\ t_{1,3} &= \alpha_{1,3} t_1 \end{aligned} \quad (3.69)$$

$$t_{1,e} = \alpha_{1,e} t_1 \quad (3.70)$$

Unidad de tratamiento 2:

$$\begin{aligned} t_{2,1} &= \alpha_{2,1} t_2 \\ t_{2,2} &= \alpha_{2,2} t_2 \\ t_{2,3} &= \alpha_{2,3} t_2 \end{aligned} \quad (3.71)$$

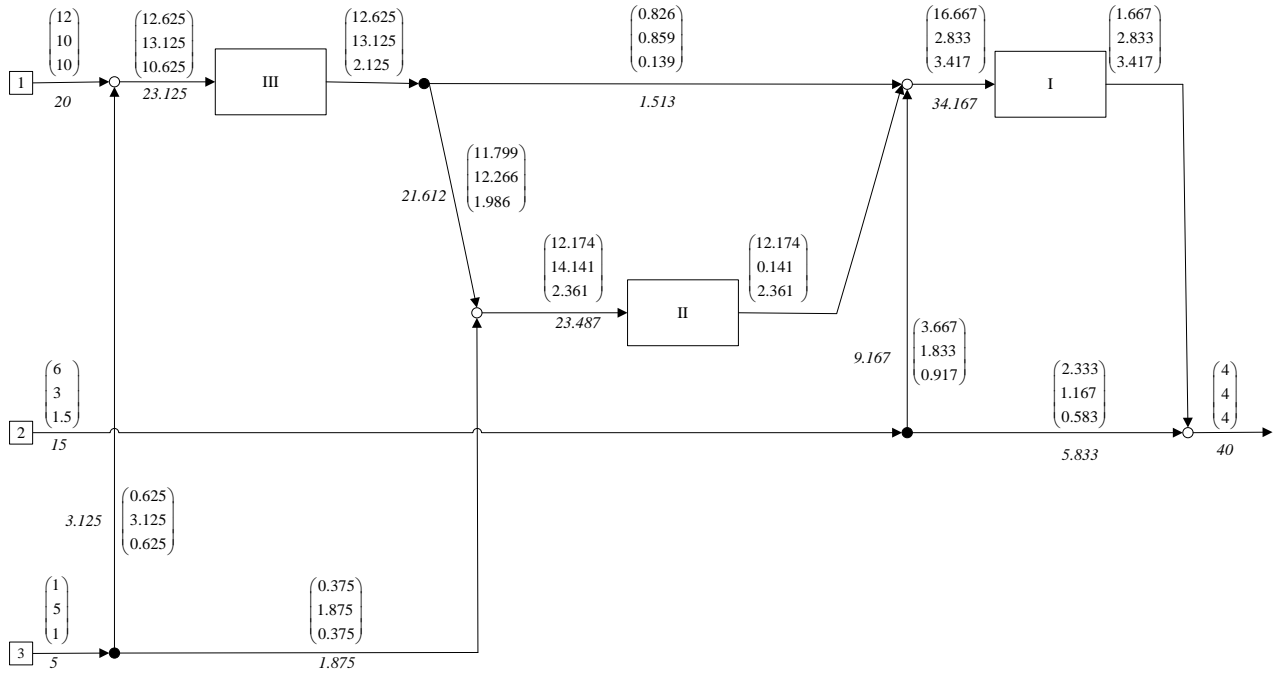
$$t_{2,e} = \alpha_{2,e} t_2 \quad (3.72)$$

Unidad de tratamiento 3:

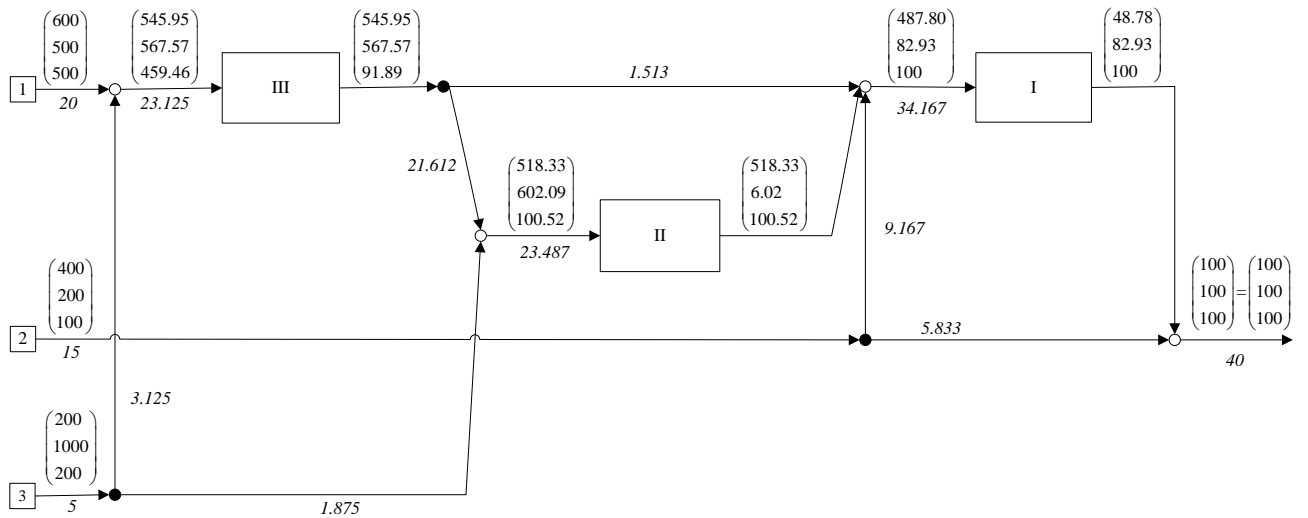
$$\begin{aligned}t_{3,1} &= \alpha_{3,1} t_3 \\t_{3,2} &= \alpha_{3,2} t_3 \\t_{3,3} &= \alpha_{3,3} t_3\end{aligned}\tag{3.73}$$

$$t_{3,e} = \alpha_{3,e} t_3\tag{3.74}$$

Al resolver el modelo PNL-R, formulado con las expresiones 3.48 a la 3.74 para este problema se obtiene el diseño mostrado en la Fig. 3.4, con un flujo total tratado de 80.779 t/h.



a) Se muestran los vectores de flujos másicos de contaminante en las corrientes



b) Se muestran los vectores de concentraciones de los contaminantes en las corrientes

Fig 3.4 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.2, con un flujo total tratado de 80.779 t/h. Se indican los flujos de efluente (t/h) en cursivas y a) los vectores de flujos másicos (kg/h), que son las variables de este modelo, y b) los vectores de concentraciones (ppm), respectivamente, con fuente normal.

### 3.4.3 Ejemplo Ilustrativo 3.3

Este problema se propuso en el trabajo de Kuo y Smith (1997) y también ha sido abordado por Galán y Grossmann (1998), Hernández-Suárez y col. (2004), Castro y col. (2007) y Ting y col. (2016) con distintos enfoques de solución.

En este caso debe removerse un solo contaminante de tres corrientes efluentes con las características mostradas en la Tabla 3.6, el límite ambiental permitido en la descarga es de 30 ppm y se dispone de 2 procesos de tratamiento, ambos están restringidos a operar con corrientes que no rebasen concentraciones máximas permitidas a la entrada del proceso. Las características de los procesos de remoción se muestran en la Tabla 3.7. Se asume que los costos del sistema son proporcionales al flujo total tratado.

Tabla 3.6 Datos de las corrientes efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.3.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración de Contaminante(ppm)
1	20	800
2	30	400
3	50	200

Tabla 3.7 Datos de los procesos de tratamiento del Ejemplo Ilustrativo 3.3.

Proceso de tratamiento	Relación de remoción (%)	Concentración máxima a la entrada (ppm)
I	90	600
II	99	200

El diseño de flujo mínimo para este problema se obtiene al optimizar la superestructura de tres corrientes y dos unidades de tratamiento de la Fig. 3.5.

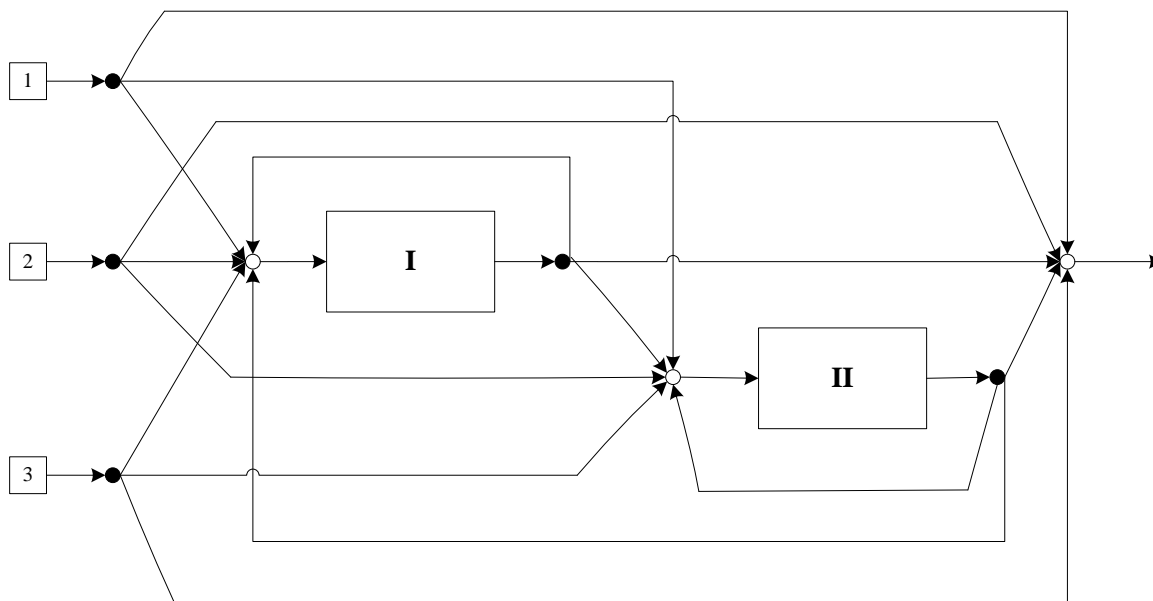
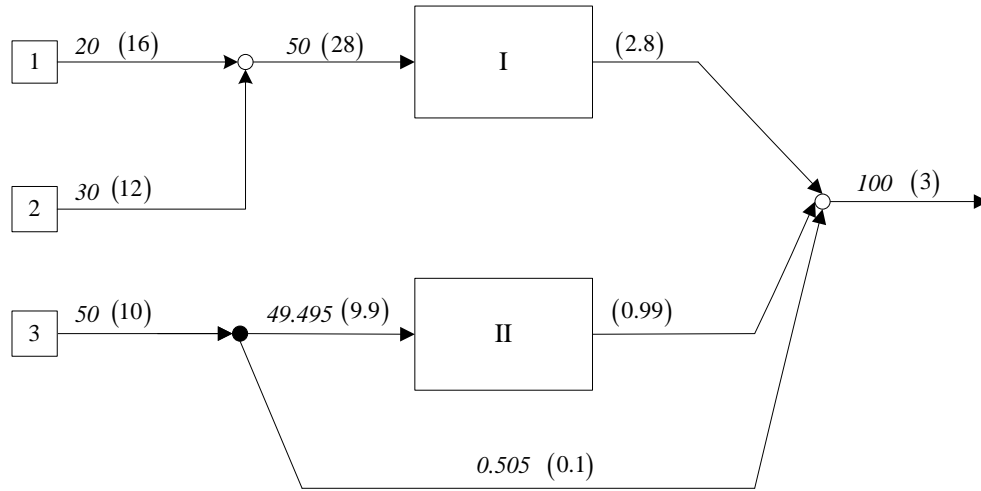
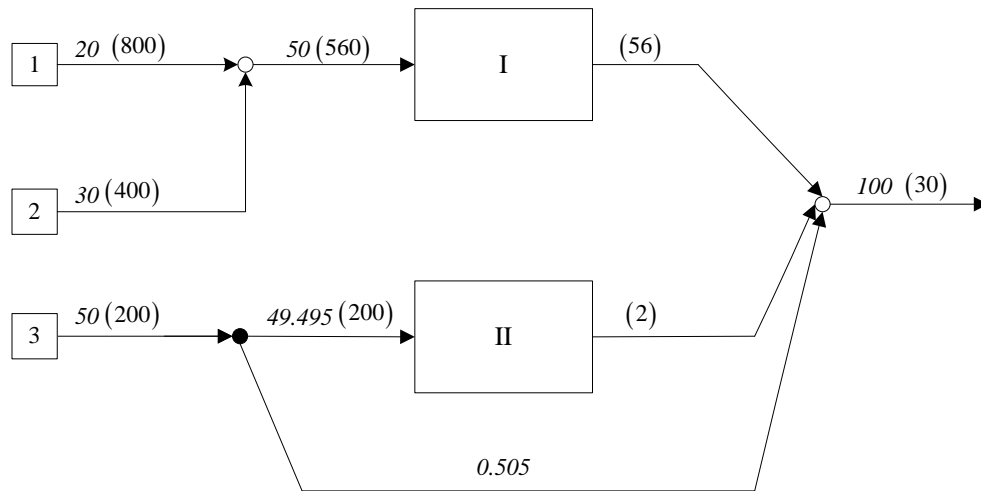


Fig. 3.5 Superestructura de red a optimizar en el Ejemplo Ilustrativo 3.3

La mejor solución obtenida para el modelo PNL-R se muestra en la Fig. 3.6, un diseño en paralelo con un flujo total tratado de 99.495 t/h, en el que como se observa se cumple con las restricciones de concentración de menos de 600 y 200 ppm a la entrada de los procesos I y II respectivamente. Esta estructura fue reportado anteriormente por Kuo y Smith (1997), Hernández-Suarez y col. (2004) y Castro y col. (2007).



a) Se muestran los vectores de flujos másicos de contaminante en las corrientes



b) Se muestran los vectores de concentraciones de los contaminantes en las corrientes

Fig 3.6 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.3 con un flujo total tratado de 99.495 t/h. Se indican los flujos de efluente (t/h) en cursivas y a) los vectores de flujos másicos (kg/h), que son las variables de este modelo, y b) los vectores de concentraciones (ppm), respectivamente, con fuente normal.

### 3.4.4 Ejemplo Ilustrativo 3.4

Hernández-Suárez y col. (2008) presentaron este problema para ejemplificar la metodología propuesta para la evaluación de redes de tratamiento óptimas y su reconfiguración en caso de que



deban satisfacer especificaciones de descarga más estrictas que aquellas para las que fueron diseñadas, las especificaciones de descarga que se muestran aquí corresponden al caso base.

En este problema se dispone de una única unidad de tratamiento para remover 5 contaminantes de 7 corrientes efluentes de manera que la corriente de descarga cumpla con los límites ambientales permitidos. En las Tablas 3.8 y 3.9 se muestran las características de las corrientes efluentes y de la unidad de tratamiento con los límites ambientales permitidos de cada contaminante respectivamente, se asume que los costos del sistema son proporcionales al flujo tratado.

Tabla 3.8 Características de las corrientes efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.4.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración de contaminante (ppm)				
		A	B	C	D	E
1	18	1390	10	250	200	400
2	25	14000	110	400	600	2800
3	50	25	100	1350	2500	3115
4	60	8550	800	45	220	230
5	36	500	300	600	500	500
6	12	50	1500	400	200	100
7	8	2300	12500	200	1000	200

Tabla 3.9 Datos de la unidad de tratamiento y límites ambientales permitidos en la descarga en el Ejemplo Ilustrativo 3.4.

Contaminante	Relación de Remoción en UT (%)	Límite Ambiental (ppm)
A	99	1000
B	70	500
C	80	150
D	60	400
E	55	600

La superestructura a optimizar en este problema se muestra en la Fig. 3.7.

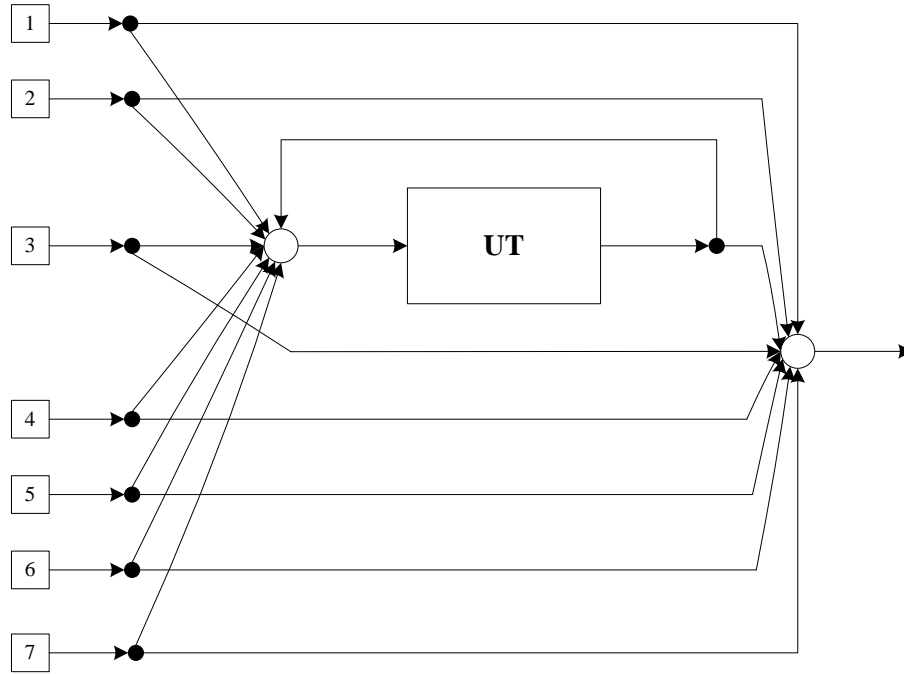
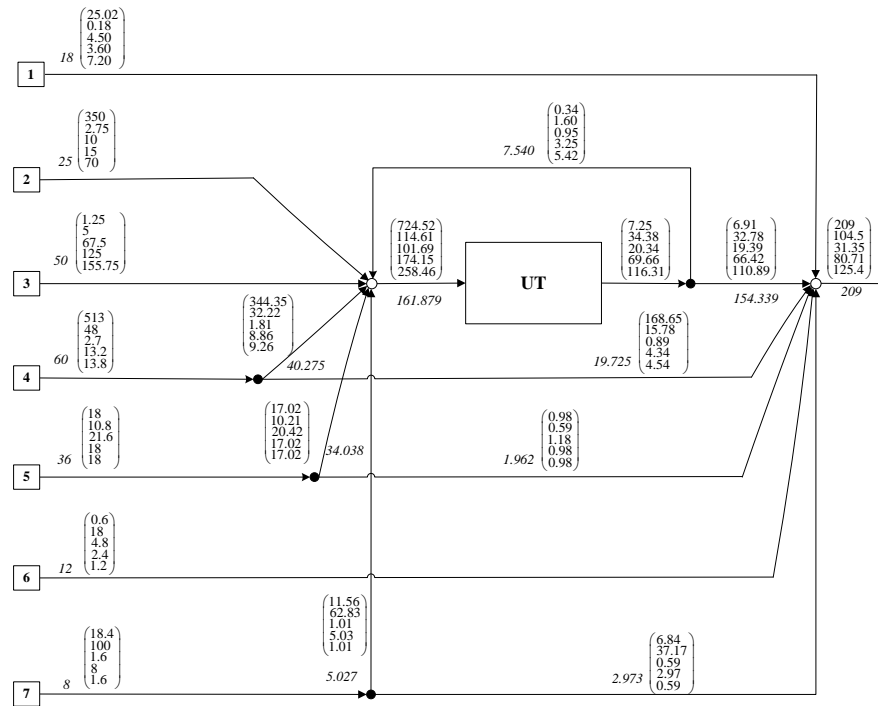
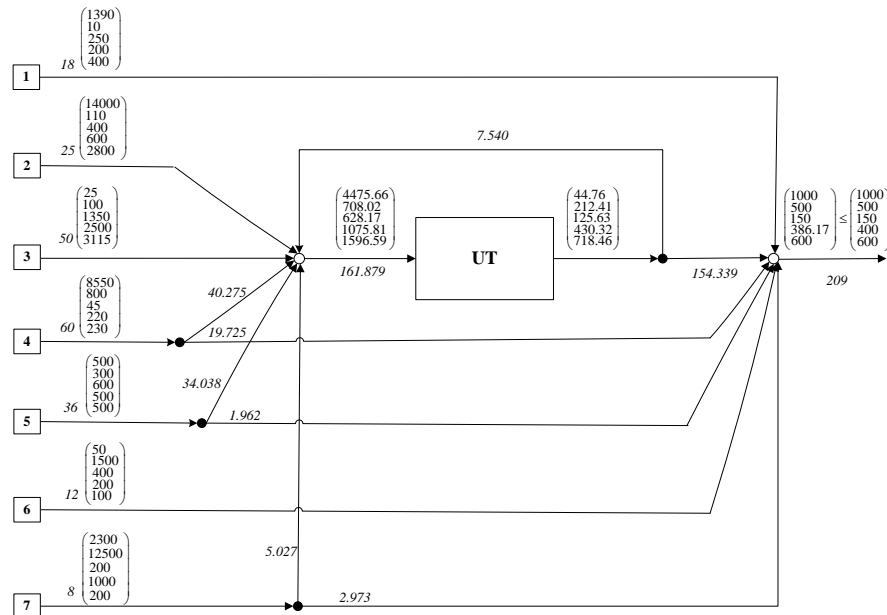


Fig. 3.7 Superestructura de red a optimizar en el Ejemplo Ilustrativo 3.4

El mejor diseño obtenido de la solución del modelo PNL-R se muestra en la Fig. 3.8, el flujo tratado es de 161.88 t/h y se observa que en este caso la mejor solución tiene un reciclo de 7.54 t/h, dos corrientes se tratan completamente, tres se tratan parcialmente y dos no necesitan ser tratadas. La misma solución fue reportada en el trabajo de Hernández-Suárez y col. (2008).



a) Se muestran los vectores de flujos másicos de contaminante en las corrientes



b) Se muestran los vectores de concentraciones de los contaminantes en las corrientes

Fig 3.8 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Ejemplo Ilustrativo 3.4, con un flujo total tratado de 161.88 t/h. Se indican los flujos de efluente (t/h) en cursivas y a) los vectores de flujos másicos (kg/h), que son las variables de este modelo, y b) los vectores de concentraciones (ppm), respectivamente, con fuente normal.

### 3.5 Conclusiones

En este capítulo se desarrolló un modelo de PNL para la síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes diferente a los existentes en la literatura y cuyas variables son flujos totales, flujos máxicos de contaminante, fracciones de división y concentraciones en el punto de descarga. El modelo PNL-R es un modelo general que permite abordar problemas con distintas características como número de corrientes, contaminantes, unidades de tratamiento y algunas restricciones de proceso. Se presentaron cuatro problemas de la literatura para los cuales se obtiene la mejor solución reportada y con los cuales se valida el modelo.

---

## Capítulo 4

# MULTI-ARRANQUE ESTOCÁSTICO

---

### 4.1 Introducción

En el Capítulo 3 se describió el modelo PNL-R para la síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes. En este modelo aparecen términos bilineales en los balances de materia en los divisores ubicados después de las unidades de tratamiento como el producto de fracciones de división por flujos máscicos de efluente o de contaminante, generando no convexidades en el modelo. Al ser el modelo PNL-R un modelo de PNL no convexo, la obtención de una solución óptima global es un problema muy complejo.

Mientras los problemas con una función objetivo y restricciones convexas poseen una región de solución factible convexa (Bazaraa y col., 2006) en la que cualquier solución óptima local es también un óptimo global y por lo tanto una vez que se ha determinado el valor de la función objetivo para una solución óptima local se sabe que este es el mejor valor posible para dicho problema, en los problemas de optimización no convexa, en los que la función objetivo o cualquiera de las restricciones son no convexas, pueden existir una gran cantidad de óptimos locales con un valor distinto de la función objetivo. Determinar una solución óptima global para un problema de PNL no convexo puede requerir de un tiempo de cómputo prohibitivo. Algunos consideran que la gran línea divisoria en la optimización es entre convexidad y no convexidad (Rockafellar, 1993).

Para abordar este tipo de problemas existen algoritmos de búsqueda local como gradiente reducido generalizado (en inglés “generalized reduced gradient”, GRG) o programación cuadrática sucesiva (en inglés “succesive quadratic programming”, SQP) (Edgar y col., 2001). El objetivo de estos algoritmos es obtener una solución óptima local en los alrededores de un cierto punto de arranque, garantizando que la solución obtenida es la mejor en una vecindad de ésta. Sin embargo, en algunos casos, el óptimo local obtenido puede tener una calidad muy inferior a la de la solución óptima global o incluso a la de otros óptimos locales (Ver Fig. 4.1), dependiendo del punto de arranque del algoritmo.

Algunos autores como Galán y Grossmann (1998), Castro y col. (2007) y Castro y col.(2008) han propuesto diferentes estrategias para generar buenos puntos de arranque para los resolvidores de PNL en problemas de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes. Sin embargo, a pesar de su utilidad, en todas estas propuestas se generan solo unos pocos puntos de arranque y conforme aumenta el número de variables de los problemas abordados y deben optimizarse superestructuras más grandes y con alta conectividad la exploración de la región factible con estas técnicas se vuelve insuficiente.

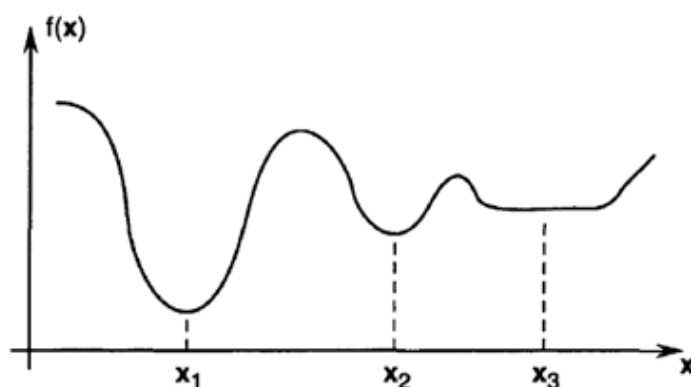


Fig. 4.1 Ilustración de diferentes óptimos locales en una función objetivo no convexa. El punto  $x_1$  es el óptimo global de la función en el dominio de la variable de decisión. Los puntos  $x_2$  y  $x_3$  son soluciones óptimas locales distintas (Chong y Zak, 2001).

Para escapar a óptimos locales y obtener la mejor solución a un problema dado existen algoritmos de optimización global determinista y técnicas estocásticas, que emplean herramientas probabilísticas y heurísticas en la búsqueda de un óptimo global. Si bien los algoritmos de optimización global determinista garantizan la obtención de una solución óptima global si el problema abordado es factible, en muchos casos la aplicación de estas técnicas es computacionalmente intratable o impráctica y tanto consideraciones teóricas como la experiencia sugieren que para problemas de dimensión moderada a alta el uso de técnicas estocásticas es el único enfoque factible de solución (Shoen 1990).

Las técnicas estocásticas se caracterizan por la aplicación de elementos aleatorios en el proceso de búsqueda de una solución óptima, si bien no puede garantizarse que la solución obtenida es un óptimo global para un problema dado, estas técnicas permiten escapar a óptimos locales y en muchos casos pueden obtenerse soluciones de alta calidad en tiempos de cómputo razonables. En estos métodos se parte de una solución inicial a la que se realizan modificaciones en cada iteración, buscando mejorar el valor de la función objetivo hasta cumplir un criterio de terminación del

algoritmo, relacionado con la calidad de la solución obtenida o con la terminación de algún recurso, como el número de iteraciones. La solución actual se modifica realizando movimientos que mejoran el valor de la función objetivo pero también se efectúan algunos movimientos determinados con elementos aleatorios, esto con la finalidad de evitar estancar la búsqueda en una sola región y explorar diferentes áreas del espacio de soluciones factibles, escapando de soluciones óptimas locales. Las modificaciones realizadas a las soluciones en cada una de las iteraciones se realizan con base en reglas propias de cada método; los movimientos pueden orientarse a explorar la región factible, diversificando las soluciones actuales o bien a mejorar la solución actual de manera local, utilizando en muchos casos, aunque no necesariamente, una combinación de ambos tipos de movimientos para mejorar la solución obtenida.

El algoritmo de búsqueda estocástico más simple para optimización global es la búsqueda meramente aleatoria (Shoen, 1990), otras técnicas de optimización más sofisticadas usan metaheurísticas para guiar el proceso de búsqueda en el espacio de solución, intentando obtener soluciones de alta calidad o cercanas al óptimo global en tiempos de cómputo razonables, algunas de estas técnicas son el recocido simulado, los algoritmos genéticos, la colonia de hormigas y la búsqueda tabú. Una desventaja de estos métodos es que su desempeño depende de la sintonización adecuada de ciertos parámetros.

En este trabajo se propone aplicar un algoritmo de optimización con multi-arranque estocástico al problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes, combinando un arranque estocástico con un algoritmo de optimización local. A pesar de que, como se mostrará adelante, este algoritmo es sencillo y fácil de implementar en comparación con técnicas metaheurísticas como las mencionadas anteriormente, actualmente no existe reportada en la literatura la aplicación de un algoritmo de multi-arranque estocástico para este problema.

### **4.2 Descripción de la técnica de multi-arranque estocástico**

En este trabajo se aplica un algoritmo iterativo de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases para solucionar problemas de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes. La metodología combina una técnica de inicialización aleatoria con un resolutor local de PNL que mejora la solución inicial obtenida. Esta estrategia de solución fue aplicada por Nuñez-Serna y Zamora (2016) al problema de optimización de redes de intercambio de calor con buenos resultados, en la Fig. 4.2 se muestra un esquema del método.

Al iniciar el algoritmo se establece el número de iteraciones a realizar,  $N$ , que es el criterio de paro; el contador de iteraciones,  $i$ , que se actualizará en cada iteración se inicializa en cero y el mejor valor obtenido de la función objetivo,  $CTA^*$ , se inicializa en infinito. En seguida se fijan las cotas de las variables de decisión de acuerdo a lo establecido en la Sección 3.3.

La parte iterativa del algoritmo está compuesta de una fase local y una fase global. En la fase global se generan de manera aleatoria valores para cada una de las variables del modelo dentro del dominio de cada variable, dado por sus cotas superior e inferior, generando un punto de arranque aleatorio. El valor de las variables en cada iteración está dado por la siguiente relación:

$$v = v^L + R_x^i (v^u - v^L)$$

Donde  $v^L$  y  $v^u$  son las cotas superior e inferior de las variables de decisión y  $R_x^i$  es un número aleatorio generado con una distribución de probabilidad uniforme en el rango  $[0,1]$  de manera independiente para cada una de las variables en cada iteración. Después de actualizar el contador de iteraciones, se inicia la fase local del algoritmo, en la que se emplea un resolutor local de PNL, como CONOPT, MINOS o SNOPT (GAMS Development Corporation, 2001). Si al terminar la fase local se obtiene una solución factible,  $x^i$ , se compara su costo,  $CTA_i$ , con  $CTA^*$ , en caso de que la nueva solución genere una disminución en los costos se actualiza  $CTA^*=CTA_i$  y  $x^*=x^i$ .

Finalmente se verifica el criterio de paro y si se ha completado el número de iteraciones,  $N$ , termina el algoritmo con  $x^*$  como la mejor solución obtenida.



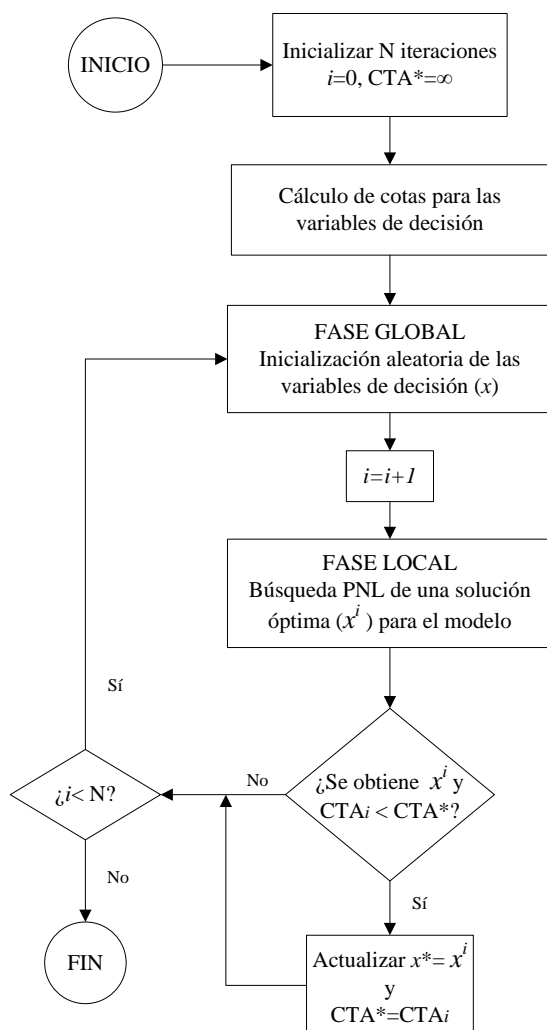


Fig. 4.2 Metodología de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases (Nuñez-Serna y Zamora, 2016).

### 4.3 Problemas Ilustrativos

En este trabajo se emplea el algoritmo de multi-arranque estocástico descrito en la Sección 4.2 como técnica de solución del modelo PNL-R para la síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes, presentado en el Capítulo 3. El algoritmo se implementó en el sistema GAMS 21.6 con CONOPT 3 como resolvidor de PNL en la fase local, el cual se basa en una implementación del algoritmo de GRG de Abadie y Carpentier (1969). En esta sección se resuelven y discuten dos problemas, para cada problema se realizaron 1000 iteraciones, encontrándose que algunos de los

puntos de arranque convergen a soluciones factibles y otros no y en ambos casos se obtienen varias soluciones factibles.

#### 4.3.1 Problema Ilustrativo 4.1

Este problema fue propuesto por Teles y col. (2012) quienes usaron una técnica de desagregación multiparamétrica para la solución de problemas de diseño de redes de tratamiento de efluentes y de uso eficiente de agua y además determinaron la solución óptima de los problemas abordados con el resolutor de optimización global determinista BARON. Por medio de la optimización de un modelo de PNL se determina con que combinación de entre un conjunto de procesos de tratamiento capaces de remover distintos contaminantes se minimiza el flujo total tratado.

Tres corrientes efluentes contaminadas con A y B, cuyas características se muestran en la Tabla 4.1, deben tratarse para cumplir con las especificaciones de descarga de 10 y 5 ppm respectivamente. Se dispone de 5 procesos de tratamiento con diferentes tasas de remoción para uno o ambos contaminantes, en este caso los procesos están restringidos a operar con concentraciones de contaminante por debajo de cierto límite en la corriente de entrada. Las características de cada proceso de tratamiento se muestran en la Tabla 4.2 y los costos del sistema se consideran proporcionales al flujo tratado.

Tabla 4.1 Datos de las corrientes efluentes del Problema Ilustrativo 4.1.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración de contaminante (ppm)	
		A	B
1	50	10	200
2	120	110	140
3	70	100	25

Tabla 4.2 Datos de los procesos de tratamiento del Problema Ilustrativo 4.1.

Proceso de tratamiento	Tasa de remoción		Concentración máxima permitida (ppm)	
	A	B	A	B
I	90	0	145	400
II	70	90	110	90
III	0	80	90	100
IV	50	0	200	90
V	65	60	50	80

La superestructura de red a optimizar en este problema incluye 5 procesos de tratamiento, como se muestra en la Fig. 4.3, diferentes combinaciones de 2,3 o más procesos de tratamiento con

diferentes condiciones de operación pueden utilizarse para generar diseños factibles que cumplan con las especificaciones de descarga.

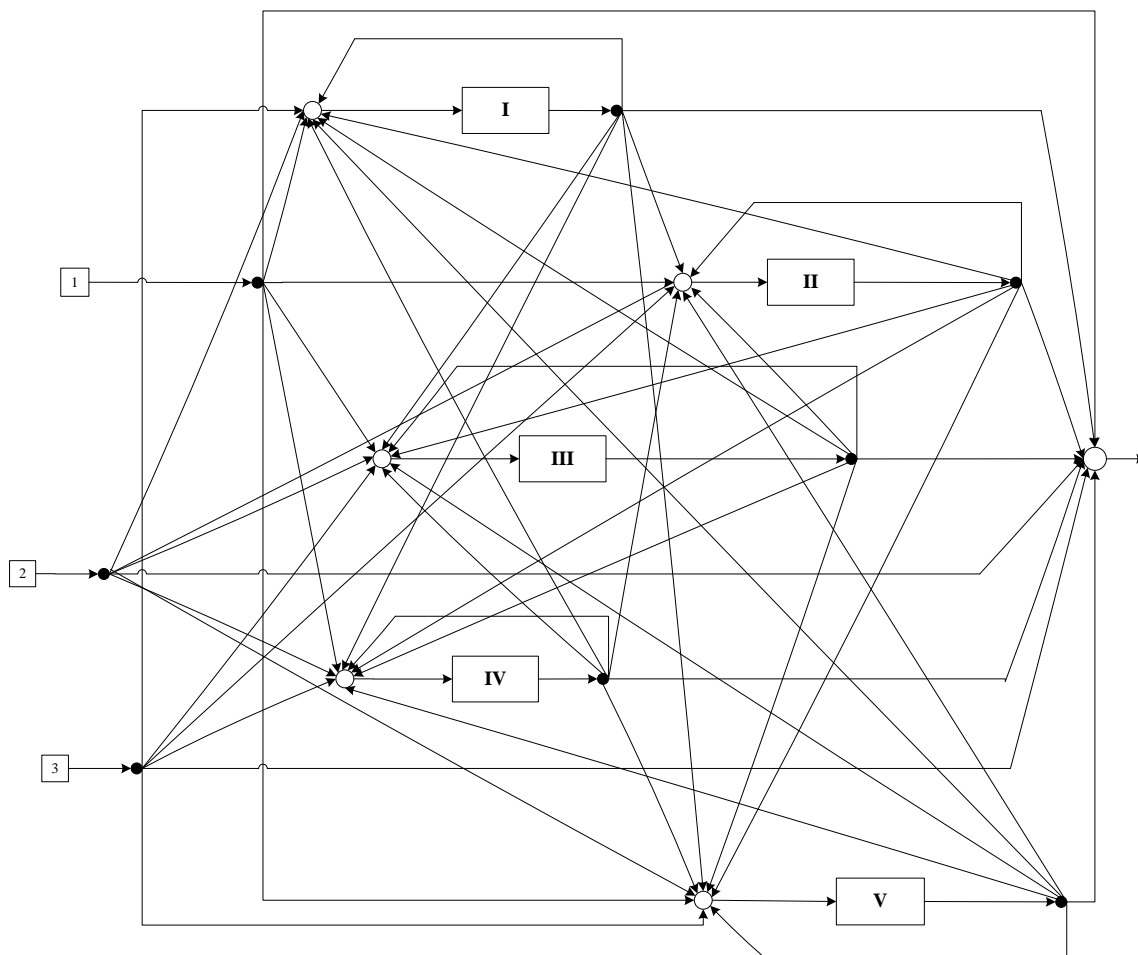


Fig. 4.3 Superestructura de red a optimizar en el Problema Ilustrativo 4.1.

Aplicando el algoritmo de multi-arranque estocástico para resolver la formulación matemática de este problema con el modelo PNL-R, se encontró que en la mayoría de las iteraciones los puntos de arranque convergieron a soluciones factibles (989). Se obtuvieron 22 soluciones (óptimos locales) distintas, el flujo total tratado en cada una de ellas se muestra en la Tabla 4.3. Se observa que en la mayoría de las soluciones obtenidas, en las que podrían quedar atrapados algunos algoritmos de optimización, el flujo total tratado es considerablemente mayor que el de la mejor solución obtenida, 513.001 t/h, y que en la solución que aparece con mayor frecuencia se trata también una cantidad superior de efluente, 575.99 t/h. Mientras que en la mayoría de las soluciones obtenidas se

utilizan tres procesos de tratamiento, en algunos casos se utilizan dos o cuatro y una de las soluciones obtenidas requiere de los cinco procesos de tratamiento.

Tabla 4.3 Diferentes soluciones obtenidas para el Problema Ilustrativo 4.1.

Flujo total tratado (t/h)	Iteración*	Frecuencia	Unidades utilizadas
513.00087	1	172	I, II, V
515.09674	2	157	II y V
567.19583	41	67	I,II y III
575.98611	7	356	I,II y III
591.51024	11	20	I,II y III
596.95149	3	59	I,II y III
599.88531	10	65	I,II y V
610.48209	34	29	I,II y III
613.07828	6	39	II, IV y V
614.37268	286	1	I, II, III, IV y V
614.44003	351	2	I, II, III y V
630.41667	239	3	II y V
649.37897	304	2	I y II
649.92687	120	2	II, III, IV y V
653.70164	748	2	II, III y V
660.83438	320	2	I y II
685.7415	182	4	II y IV
703.27966	915	1	II y IV
856.38343	616	2	I, III y V
862.0775	402	2	I, III y V
913.35852	153	1	I, III y V
915.46104	723	1	I, III y V

\*No. de iteración en que se obtuvo por primera vez la solución.

La mejor solución obtenida con la técnica de multi-arranque estocástico es la misma que Teles y col. (2012) reportan como la solución óptima global para este problema y se muestra en la Fig. 4.2. En este diseño se utilizan las unidades I, II y V para la remoción de los contaminantes A y B que se descargan en sus límites ambientales permitidos. Todas las corrientes reciben tratamiento en la unidad II, que tiene altas tasas de remoción para los dos contaminantes y presenta una corriente de reciclo para cumplir con la restricción de 90 ppm en la concentración de B en la corriente de entrada. De la corriente de salida de la unidad II se envían flujos del efluente tratado a la unidad V y a la unidad I, que operan en paralelo y una parte a la descarga.

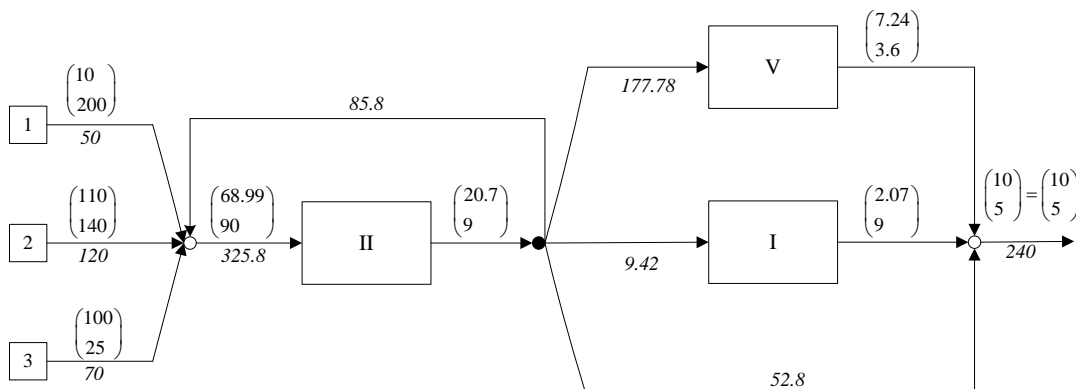


Fig. 4.4 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema Ilustrativo 4.1, con un flujo total tratado de 513 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

Otra solución frecuente es la que aparece en la Fig. 4.3 con un flujo total tratado de 515.097 t/h, ligeramente superior al de la solución óptima global. Este diseño puede constituir una buena alternativa, pues si bien el flujo total tratado es ligeramente superior, se necesitan solo dos procesos de tratamiento para cumplir con las especificaciones de descarga. Si se guardan las mejores soluciones obtenidas con el algoritmo propuesto se tiene la ventaja adicional de contar con varias alternativas de diseño en caso de que por alguna razón no fuese posible implementar la mejor solución.

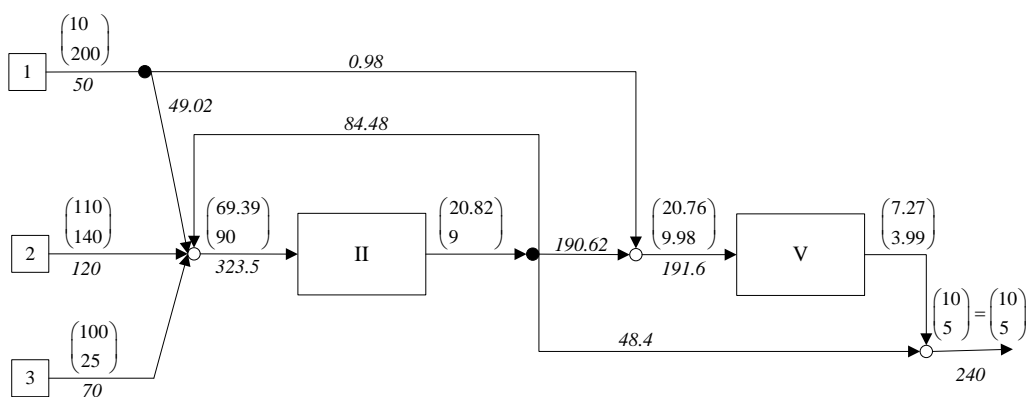


Fig. 4.5 Diseño alternativo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema Ilustrativo 4.1, con un flujo total tratado de 515.1 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

### 4.3.2 Problema Ilustrativo 4.2

Este problema fue presentado por Castro y col. (2007), quienes realizaron algunas modificaciones a los datos de un problema de Galán y Grossmann (1998). Castro y col. (2007) resuelven un conjunto de problemas de diseño de redes de tratamiento de efluentes con una técnica heurística, partiendo de varios puntos de arranque generados a partir de relajaciones lineales de los problemas originales se inicializan algoritmos locales de PNL, las soluciones obtenidas se comparan con la solución óptima global determinada por el resolvidor BARON.

Se dispone de tres unidades de tratamiento con las tasas de remoción mostradas en la Tabla 4.5 para remover 6 contaminantes de cinco corrientes efluentes con las características mostradas en la Tabla 4.4 de manera que en la corriente de descarga todos los contaminantes tengan concentraciones por debajo de 100 ppm.

Tabla 4.4 Datos de las corrientes efluentes del Problema Ilustrativo 4.2.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración de contaminante (ppm)					
		A	B	C	D	E	F
1	19	1100	500	500	200	800	100
2	7	40	0	100	300	910	200
3	8	200	220	200	500	150	0
4	6	60	510	500	200	780	100
5	17	400	170	100	300	900	0

Tabla 4.5 Datos de los procesos de tratamiento del Problema Ilustrativo 4.2.

Proceso de Tratamiento	Tasa de Remoción (%)					
	A	B	C	D	E	F
I	0.99	0.99	0	0	0	0
II	0	0	0.99	0.99	0	0
III	0	0	0	0	0.99	0.99

En este caso debe optimizarse la superestructura mostrada en la Fig. 4.6, que incluye todas las conexiones viables entre las cinco corrientes y las tres unidades de tratamiento. La solución óptima del problema proporciona las conexiones de esta superestructura que deben mantenerse, junto con las condiciones de operación requeridas para cumplir con las especificaciones de descarga al menor costo posible.

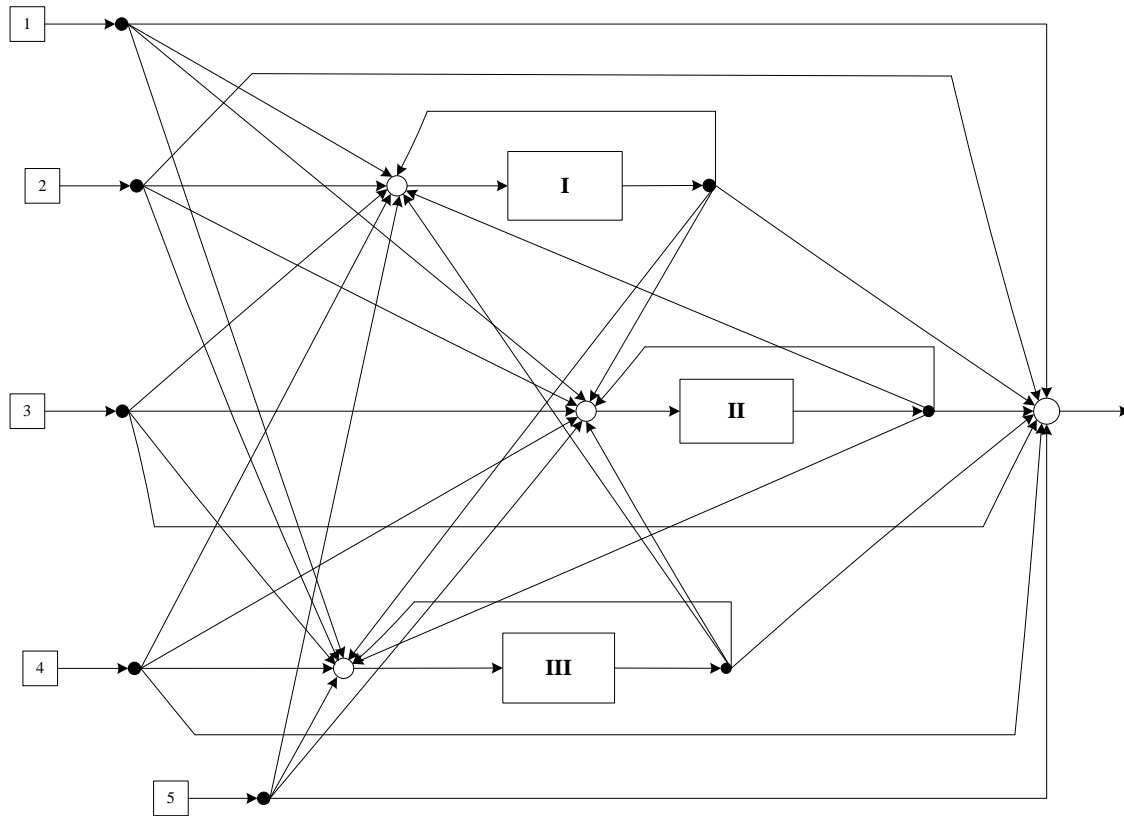


Fig. 4.6 Superestructura a optimizar en el Problema Ilustrativo 4.2

Al aplicar la técnica de multi-arranque estocástico a este problema, se encontró convergencia a soluciones factibles en 664 de las 1000 iteraciones realizadas, obteniéndose 8 soluciones distintas que se reportan en la Tabla 4.6. En la solución más frecuente se tratan 113.69 t/h y en la solución de mayor costo obtenida se tratan 123.50 t/h, mientras que en la mejor solución se tratan 109.40 t/h, que representa una disminución considerable en comparación con otras soluciones. En todas las soluciones obtenidas se utilizan las tres unidades, pues en cada una de ellas se remueven contaminantes distintos.

Tabla 4.6 Diferentes soluciones obtenidas para el Problema Ilustrativo 4.2.

Flujo total tratado en la solución (t/h)	Iteración*	Frecuencia
109.40140	4	78
109.65736	16	27
113.69334	21	106
113.90038	8	92
118.75388	3	72
119.23675	2	123
122.70740	9	79
123.50182	13	86

\*No. de iteración en que se obtuvo por primera vez la solución.

La mejor solución obtenida se muestra en la Fig. 4.7 con un flujo total tratado de 109.4 t/h, que es la misma solución reportada por Castro y col. (2007) como la solución óptima global del problema. Todas las corrientes se tratan parcialmente en una o varias unidades que presentan un arreglo en serie. Los contaminantes A, B, C, D y E se descargan en su límite ambiental, mientras que el contaminante F se descarga muy por debajo, a 8.94 ppm.

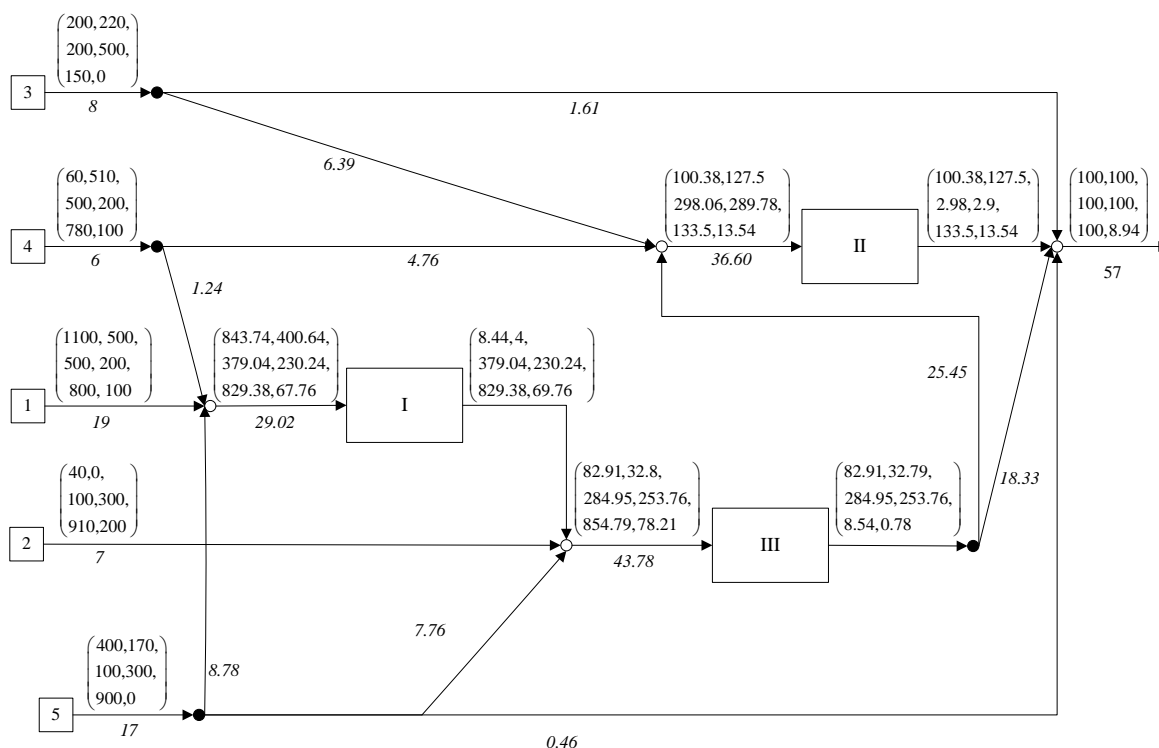


Fig. 4.7 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema Ilustrativo 4.2, con un flujo total tratado de 109.4 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.



### 4.4 Conclusiones

La técnica de multi-arranque estocástico aplicada en este trabajo es un enfoque de solución práctico para la síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes que permite una amplia exploración de la región factible. Como se observa de los resultados obtenidos en los problemas 4.1 y 4.2, el algoritmo puede detectar varios óptimos locales, de entre los cuales se elige la mejor solución.

Los dos problemas resueltos en este capítulo proporcionan más evidencia que valida el modelo PNL-R, pues en ambos casos se reproducen soluciones reportada previamente en la literatura, más aún, las soluciones obtenidas por este método son las soluciones determinadas en la literatura como óptimos globales para los Problemas Ilustrativos 4.1 y 4.2, lo que muestra también que el algoritmo de optimización con multi-arranque estocástico aplicado tienen la capacidad de obtener soluciones óptimas globales.

De los resultados obtenidos se deduce también que existen problemas de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes con multiplicidad de óptimos locales. En ambos problemas abordados se obtienen distintas soluciones óptimas locales y en las soluciones más frecuentes se trata una cantidad considerablemente mayor de efluente en relación con la mejor solución obtenida, es posible que la mayor parte de los puntos de arranque converjan a estas soluciones. En el caso del Problema Ilustrativo 4.1, en la solución obtenida con más frecuencia se tratan 62.985 t/h de efluente más que en la mejor solución, una cantidad importante, que puede generar altos costos de capital y operación, además, aunque pocas veces, se obtienen soluciones en que se utilizan cuatro o incluso las cinco unidades de tratamiento, sin que esto sea necesario para cumplir con las restricciones de concentración en las unidades o las especificaciones de descarga. Si se parte de un mal punto de arranque, un resolutor de PNL puede obtener este tipo de soluciones, aún cuando existan otras mejores.

---

## Capítulo 5

# RESULTADOS OBTENIDOS

---

### 5.1 Introducción

El modelo PNL-R, descrito en el Capítulo 3, y la técnica de multi-arranque estocástico detallada en el Capítulo 4 se utilizaron para modelar y resolver un total de 17 problemas de síntesis de sistemas de tratamiento de efluentes de la literatura con diferentes características como número de unidades de tratamiento, corrientes, contaminantes y restricciones de proceso. Las principales características de los problemas abordados se muestran en la Tabla 5.1, en la que los problemas aparecen ordenados de acuerdo a su tamaño, de menor a mayor cantidad de variables utilizadas por el modelo PNL-R, como se observa, el número de variables y restricciones, y por lo tanto la complejidad del problema, aumentan principalmente con el aumento en las unidades de tratamiento, como señalaron Hernández-Suárez y col. (2004).

El modelo y el algoritmo de multi-arranque estocástico se implementaron en el sistema GAMS 21.6 con CONOPT 3 como resolutor de PNL en la fase local, utilizando un equipo con procesador Intel Core i7 operando a 3.20 GHZ y 12 GB de memoria RAM. El número de iteraciones del algoritmo se fijó en 1000 para todos los problemas, se consideró este número a manera de prueba, buscando identificar la mejor solución para cada problema abordado, sin embargo, como se observará más adelante en este capítulo, esta cantidad es muy superior al número de iteraciones que realmente se requieren para obtener las mejores soluciones, por lo que podría ajustarse el valor, reduciendo el tiempo de cómputo requerido por el algoritmo.

Los problemas 3.2, 3.3, 3.4, 4.1, 4.2 y 5.2 fueron presentados y resueltos en los Capítulos 3 y 4, en todos ellos se reproducen soluciones obtenidas anteriormente en la literatura con otras metodologías, con lo que se validan el modelo y el método propuestos en este trabajo. Los problemas restantes y los resultados obtenidos para cada uno de ellos se discuten en las secciones siguientes.

Tabla 5.1 Características de los problemas abordados con la técnica de multi-arranque estocástico.

Problema	Autor	Características*	Variables	Restricciones
5.1	Wang y Smith (1994)	1-1-3	17	16
5.2	Zamora y col.(2004)	1-5-3	31	33
5.3	Wang y Smith (1994)	2-1-2	32	31
3.3	Kuo y Smith (1997)	2-1-3	35	32
5.4	Wang y Smith (1994)	2-2-2	43	42
3.4	Hernández Suárez y col. (2008)	1-5-7	45	44
5.5	Hernández Suárez y col. (2004)	2-5-7	91	86
3.2	Kuo y Smith (1997)	3-3-3	97	92
5.6	Takama y col. (1980) – Kuo y Smith (1997)	3-3-3	97	92
5.7	Takama y col. (1980) – Kuo y Smith (1997)	3-3-3	97	92
5.8	Takama y col. (1980) – Wang y Smith (1994)	3-3-3	97	92
4.2	Galán y Grossmann (1998) – Castro y col. (2007)	3-6-5	162	160
4.1	Teles y col. (2012)	5-2-3	166	152
5.9	Teles y col. (2012)	6-2-2	215	198
5.10	Galán y Grossmann (1998) – Castro y col. (2007)	5-6-5	342	328
5.11	Galán y Grossmann (1999)	5-5-15	361	292
5.12	Galán y Grossmann (1998)	5-6-12	384	335

\*Los problemas abordados se describen según el siguiente código: Número de unidades de tratamiento-Número de contaminantes-Número de corrientes.

## 5.2 Problema 5.1

Wang y Smith (1994) propusieron una metodología conceptual para el diseño de sistemas de tratamiento de efluentes que dio lugar al “water pinch”, para ejemplificar la aplicación de dicha metodología propusieron tres problemas. Los problemas de Wang y Smith (1994), Problemas 5.1, 5.3 y 5.4 de la Tabla 5.1, se encuentran entre los más sencillos abordados en este trabajo, con pocas variables y pocas restricciones. A continuación se describe el Problema 5.1, abordado también por Galán y Grossmann (1998), Castro y col. (2007) y Ting y col. (2016).

Las tres corrientes efluentes cuyos datos se muestran en la Tabla 5.2 deben tratarse de manera total o parcial en una unidad de tratamiento con una tasa de remoción de 0.99 para el contaminante  $i$ , de manera que en la corriente de descarga la concentración de este contaminante no rebase el límite ambiental permitido de 20 ppm.

Tabla 5.2 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.1.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración del contaminante $i$ (ppm)
1	40	400
2	30	100
3	20	30

Al aplicar el algoritmo de multi-arranque estocástico a este problema de pocas variables y restricciones se obtiene convergencia a soluciones factibles en 999 de las 1000 iteraciones y en todos los casos, la solución obtenida es la que se muestra en la Fig. 5.1, en la cual se tratan 59.798 t/h de efluente y el contaminante  $i$  se descarga en su límite ambiental. La misma estructura fue reportada por Wang y Smith (1994) y los otros autores que abordaron el problema. Castro y col. (2008) probaron optimalidad global para esta solución con el resolutor GAMS/BARON.

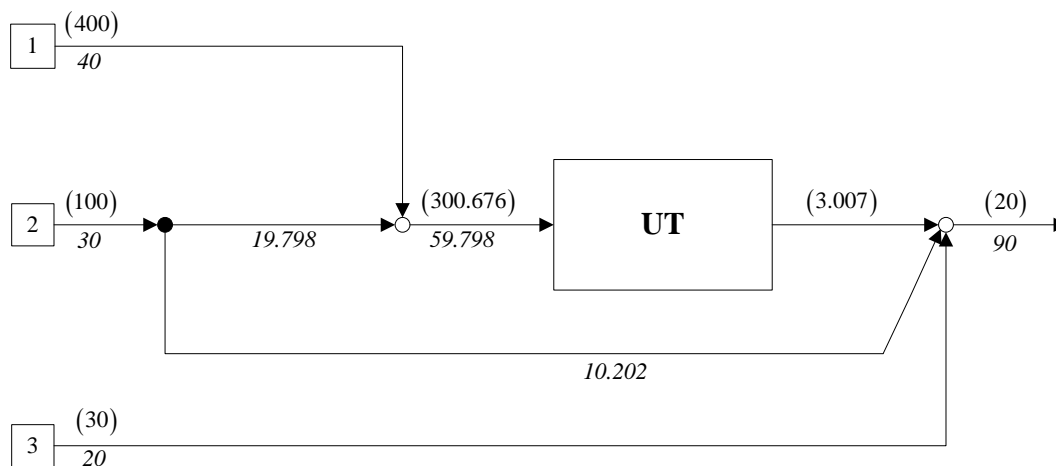


Fig. 5.1 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.1 con un flujo total tratado de 59.798 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

### 5.3 Problema 5.2

El Problema 5.2, propuesto por Zamora-Mata y col. (2004), se abordó también en el Capítulo 3 como Ejemplo Ilustrativo 3.1 para ejemplificar y validar el modelo PNL-R, a continuación se

describe nuevamente el problema y se presentan y discuten los resultados obtenidos con la metodología de multi-arranque estocástico.

Debe diseñarse un sistema de tratamiento para remover los contaminantes A, B y C de tres corrientes efluentes, de manera que se cumpla con el límite ambiental permitido para cada uno de ellos en el punto de descarga, para lo cual se dispone de una unidad de tratamiento que remueve simultáneamente los tres contaminantes presentes. Los datos de las corrientes y la unidad de tratamiento se muestran en las Tablas 5.3 y 5.4 y por bases de diseño el sistema de tratamiento debe cumplir las siguientes restricciones:

- i) El contaminante C debe satisfacer una concentración fija de 45 ppm a la salida de la unidad de tratamiento.
- ii) El contaminante A debe tener una concentración de a lo más 430 ppm a la entrada de la unidad de tratamiento.
- iii) El proceso de remoción exige que el flujo de la corriente 4 sea al menos un tercio del flujo de la corriente 3 en la corriente de mezclado que entra a la unidad de tratamiento.

Los costos de la unidad de tratamiento están en función del flujo tratado,  $t$  (t/h). El costo de capital se determina como  $10300t$  y el costo de operación como  $0.0022t$ . Se considera una tasa anual de retorno de 10% y la operación de la planta de aproximadamente 3822 h anuales.

Tabla 5.3 Características de las corrientes efluentes del Problema 5.2.

Corriente No.	Flujo (t/h)	Concentración de contaminante		
		A (ppm)	B (ppm)	C (ppm)
1	10	930	300	400
2	38	350	0	150
3	25	200	700	350
4	12	0	350	300
5	30	700	150	900

Tabla 5.4 Relaciones de remoción de la UT y límites ambientales permitidos para cada contaminante del Problema 5.2.

Contaminante	Relación de remoción en UT (%)	Límite ambiental permitido (ppm)
A	95	60
B	85	50
C	90	70

Al implementar el algoritmo de multi-arranque estocástico para este problema se obtuvieron un total de 75 soluciones distintas, con diferente estructura pero todas con el mismo costo de 107012.14 \$/año. Mientras que las diferencias en la estructura de estos diseños no tienen un impacto en el costo, si lo tienen en las concentraciones de descarga obtenidas en el sistema de tratamiento, en la Tabla 5.5 se muestran a manera de ejemplo detalles de algunas de estas soluciones.

Tabla 5.5 Características principales de 6 soluciones obtenidas para el Problema 5.2 y su frecuencia.

Solución	Flujo tratado	Flujo de reciclaje	Concentraciones de Descarga			Frecuencia
			$C_{A,e}$	$C_{B,e}$	$C_{C,e}$	
1	102.081	4.830	60	49.02	67.02	399
2	102.081	4.644	60	50	67.02	98
3	102.081	0.244	60	45.95	67.02	1
4	102.081	0	60	43.82	67.02	6
5	102.081	3.349	60	50	67.02	1
6	102.081	0	60	41.88	67.02	9

Ya que en este caso todos los diseños cuestan lo mismo, el criterio para elegir el mejor de ellos fueron las concentraciones de descarga, a continuación se muestran y comparan el mejor diseño obtenido en la Fig. 5.2, que es el mismo que reportan Zamora-Mata y col. (2004), y el diseño de la Solución 2 de la Tabla 5.5 en la Fig. 5.3, que se obtuvo con más frecuencia que la mejor solución. En este caso, por el mismo costo se obtiene una mayor remoción del contaminante B en el sistema de la Fig. 5.2 con respecto al sistema de la Fig. 5.3, y por lo tanto un menor impacto ambiental e incluso podrían reducirse los costos por concepto de disposición de residuos (Ver por ejemplo, Galán y Grossmann, 2011).

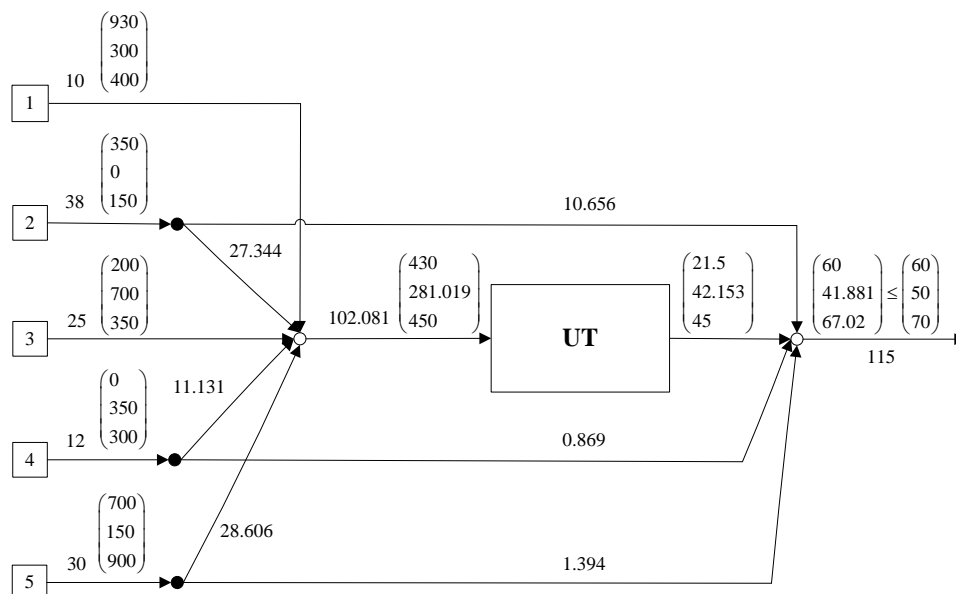


Fig. 5.2 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.2 correspondiente a la Solución 6 de la Tabla 5.5, con un CTA de 107012.14 \$/año y concentraciones de descarga de 60, 41.88 y 67.02 ppm. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

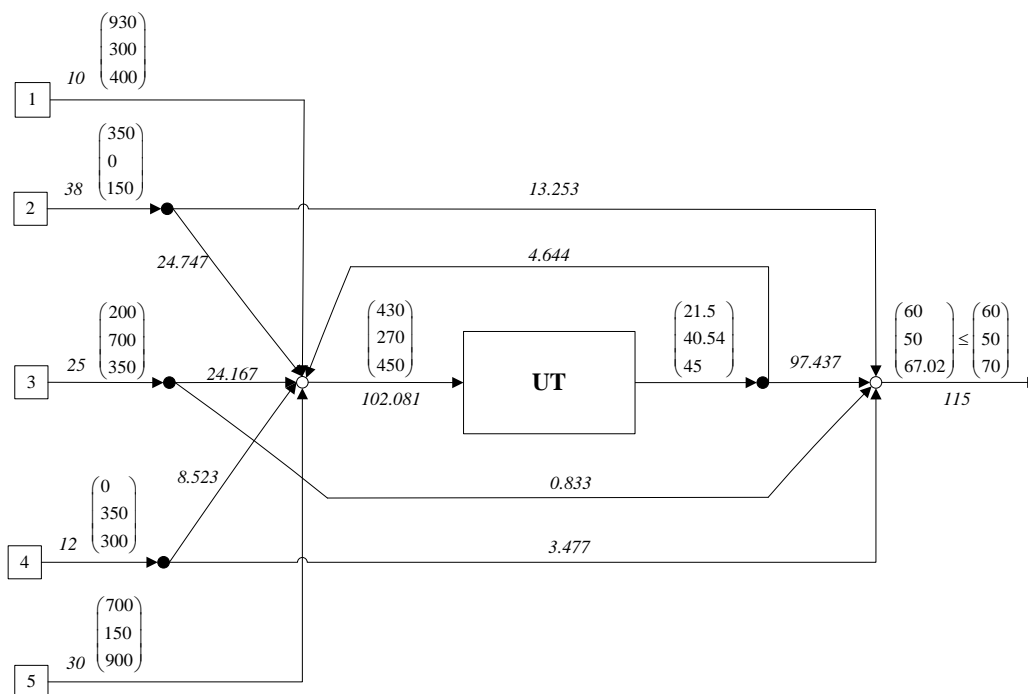


Fig. 5.3 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.2 correspondiente a la Solución 2 de la Tabla 5.5, con un CTA de 107012.14 \$/año y concentraciones de descarga de 60, 50 y 67.02 ppm. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

En ambos diseños se tratan dos corrientes de manera total y tres de manera parcial. En el diseño de la Fig. 5.3 disminuyen los flujos tratados de las corrientes 3 y 4, que son las que tienen mayor concentración del contaminante B, por lo que se remueve una menor cantidad de este contaminante y su concentración en la corriente de descarga aumenta. Como en el diseño de la Fig. 5.3, la mayoría de los diseños obtenidos tienen corrientes de reciclaje en su estructura, los cuales en este problema no resultan de ninguna utilidad práctica, a pesar de que en otros casos pueden ser aprovechables para disminuir los costos o las concentraciones de descarga.

Si bien para este problema no es difícil lograr convergencia a puntos factibles, que se obtienen en las 1000 iteraciones realizadas y todas las soluciones óptimas locales obtenidas tienen el mismo costo, la mejor solución obtenida no es muy frecuente, ya que se obtuvo en solo 9 de las iteraciones, es decir en menos del 1%.

#### 5.4 Problema 5.3

Este problema propuesto por Wang y Smith (1994) ha sido abordado también por Galán y Grossmann (1998), Castro y col. (2007), Statyukha y col. (2008), Castro y col. (2009) y Ting y col. (2016) con distintas metodologías. Castro y col. (2007) obtuvieron la solución óptima global para este problema con el resolutor GAMS/BARON.

Debe diseñarse un sistema de tratamiento para las dos corrientes efluentes cuyos datos se muestran en la Tabla 5.6, de manera que la corriente de descarga cumpla con el límite ambiental permitido de 10 ppm para un contaminante a remover. Se dispone de dos procesos de tratamiento que remueven este contaminante con las tasas de remoción mostradas en la Tabla 5.7, ambas unidades de tratamiento requieren operar con una concentración de entrada menor a la máxima permitida que se muestra en esta tabla. Los costos del sistema de tratamiento son proporcionales al flujo total tratado.

Tabla 5.6 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.3.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración de contaminante (ppm)
1	60	400
2	20	800



Tabla 5.7 Datos de las unidades de tratamiento del Problema 5.3.

UT	Tasa de remoción (%)	Concentración máxima permitida (ppm)
I	99	200
II	80	1000

Al aplicar la técnica de multi-arranque estocástico a este problema se obtiene convergencia a puntos factibles en 998 iteraciones, se obtienen dos soluciones distintas que se muestran en la Tabla 5.8. Como se observa, la mejor solución, que es la misma que Castro y col. (2007) reportan como solución óptima global, se obtiene con una frecuencia considerablemente mayor. Cabe destacar que aunque se trata de un problema muy sencillo, con la técnica del punto de pliegue, Wang y Smith obtienen un diseño en el que se tratan 153 t/h, una cantidad muy superior a la de la solución óptima global, que se muestra en la Fig. 5.4, con un flujo total tratado de 130.703 t/h.

Tabla 5.8 Óptimos locales obtenidos para el Problema 5.3.

Flujo total tratado (t/h)	Flujo tratado por unidad (t/h)		Frecuencia
	UT I	UT II	
197.9798	197.9798	0	5
130.7025	73.974	56.729	993

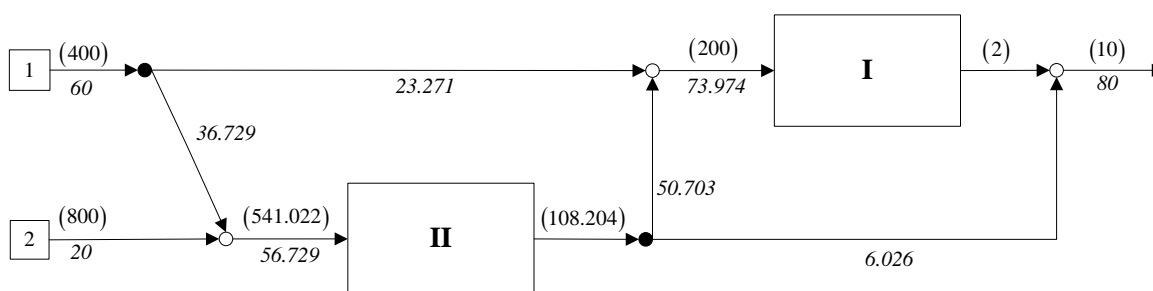


Fig.5.4 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.3 con un flujo total tratado de 130.703 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

### 5.5 Problema 5.4

El Problema 5.4 es el más abordado y también el más complejo de los problemas propuestos en el trabajo de Wang y Smith (1994), este problema lo han abordado Galán y Grossmann (1998), Hernández-Suárez y col. (2004), Castro y col. (2007), Statyukha y col. (2008), Castro y col. (2009), Liu y col. (2013) y Ting y col. (2016). Castro y col. (2007) obtuvieron la solución óptima global de este problema con el resolutor GAMS/BARON.

Las dos corrientes efluentes cuyos datos se muestran en la Tabla 5.9 deben tener, después de mezclarse en el punto de descarga, una concentración menor al límite ambiental permitido de 10 ppm para los contaminantes A y B. Se dispone de dos procesos de tratamiento, cada uno remueve uno de los contaminantes con las tasas de remoción mostradas en la Tabla 5.10. Se asume que los costos del sistema son proporcionales al flujo total tratado.

Tabla 5.9 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.4.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración de contaminante (ppm)	
		A	B
1	40	100	20
2	40	15	200

Tabla 5.10 Datos de las unidades de tratamiento del Problema 5.4.

Unidad de Tratamiento	Remoción de contaminantes (%)	
	A	B
I	95	0
II	0	97.6

Al aplicar la técnica de multi-arranque estocástico se convergió a puntos factibles en 781 de los casos, para este problema se obtuvieron 2 óptimos locales con estructuras en serie I-II y II-I, reportadas previamente por Hernández-Suárez y col. (2004) y con descargas de los dos contaminantes a 10 ppm, las principales características de estas dos soluciones se muestran en la Tabla 5.11 y la Fig. 5.5 muestra el mejor diseño obtenido, mismo que Castro y col. (2007) reportan como solución óptima global.

Tabla 5.11 Soluciones obtenidas para el Problema 5.4.

Flujo total tratado (t/h)	Flujo tratado por unidad (t/h)		Frecuencia
	UT I	UT II	
89.8361	40	49.8361	548
110.954	61.1180	49.8361	233

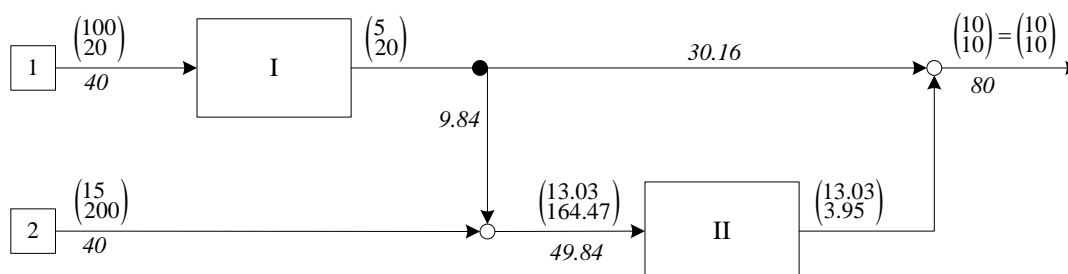


Fig. 5.5 Diseño óptimo global del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.4, con un flujo total tratado de 89.84 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

## 5.6 Problema 5.5

El Problema 5.5 de la Tabla 5.1 fue propuesto por Hernández-Suárez y col. (2004), quienes lo resuelven aplicando un enfoque de descomposición y optimización paramétrica de la superestructura de red, generando diseños óptimos para las distintas secuencias posibles de las unidades de tratamiento, este problema también fue abordado por Poplewski y Jezowski (2007).

Las 7 corrientes de la Tabla 5.12 deben tratarse para remover los contaminantes A, B, C, D y E de manera que se cumpla con los límites ambientales permitidos en la corriente de descarga para cada uno de los contaminantes. Se dispone de 2 unidades de tratamiento cuyas tasas de remoción se muestran en la Tabla 5.13 junto con los límites ambientales permitidos para cada contaminante. Los costos del sistema son proporcionales al flujo total tratado.

Tabla 5.12 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.5.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración de contaminante (ppm)				
		A	B	C	D	E
1	18	1390	10	250	200	400
2	25	14000	110	400	600	2800
3	50	25	100	1350	2500	3115
4	60	8550	800	45	220	230
5	36	500	300	600	500	500
6	12	50	1500	400	200	100
7	8	2300	12500	200	1000	200

Tabla 5.13 Datos de las unidades de tratamiento y límites ambientales permitidos para cada contaminante del Problema 5.5.

UT	Tasa de remoción de contaminante (%)				
	A	B	C	D	E
I	99	70	80	60	55
II	90	88	55	85	90
Límite ambiental (ppm)	150	200	140	175	200

Aplicando la técnica de multi-arranque estocástico a este problema se obtiene convergencia a puntos factibles en 995 de los casos, con 2 soluciones óptimas locales con arreglos I-II y II-I que operan en serie y son las mismas obtenidas por Hernández-Suárez y col. (2004). Las características principales de dichas soluciones se muestran en la Tabla 5.14, la mejor solución se obtiene 621 veces y la Solución 2 se obtiene 374 veces. El mejor diseño obtenido para este problema, que también fue obtenido por Poplewski y Jezowski (2007), se muestra en la Fig. 5.6, se tratan 238.13 t/h y 6 de las 7 corrientes reciben tratamiento total o parcial.

Tabla 5.14 Óptimos locales diferentes obtenidos para el sistema de tratamiento del Problema 5.5

Solución	Flujo tratado (t/h)			Concentración de descarga (ppm)				
	Total	UT I	UT II	A	B	C	D	E
1	238.13	160.92	77.21	150	200	140	153.17	200
2	271.24	104.85	166.39	150	180.71	140	148.77	200

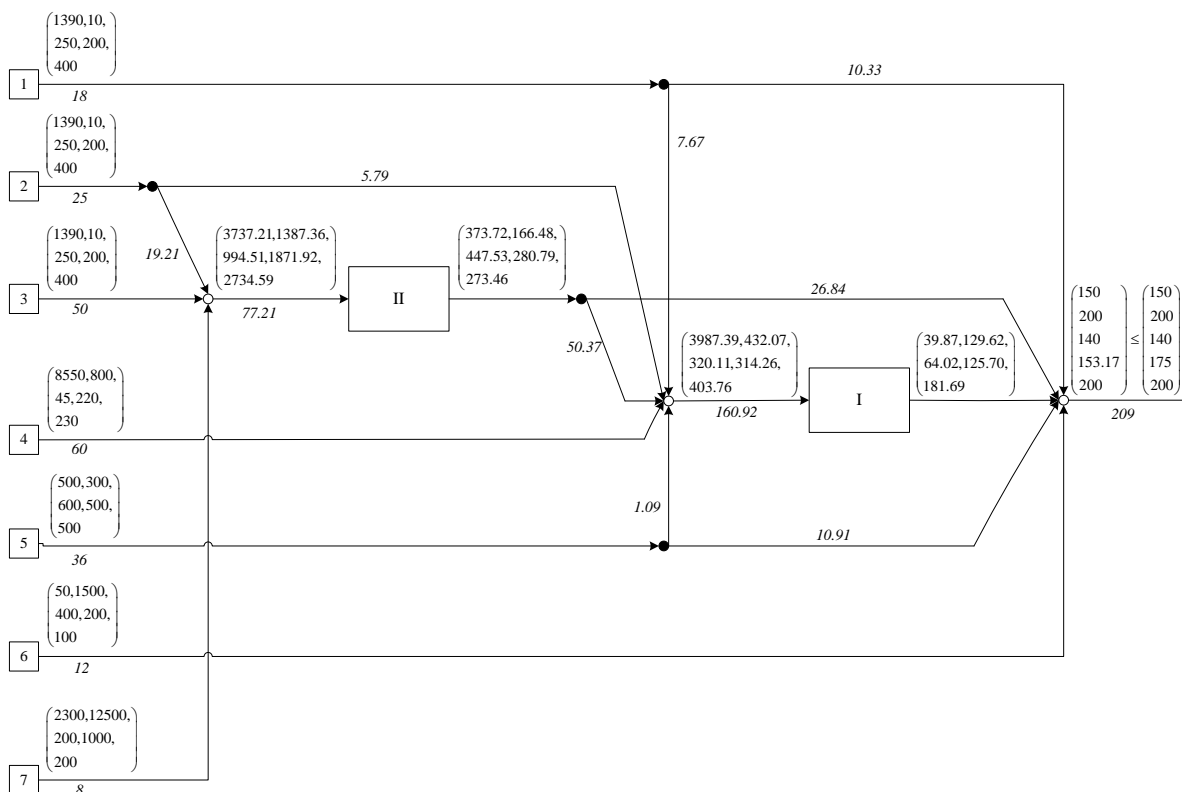


Fig. 5.6 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.5 con un flujo total tratado de 238.13 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

## 5.7 Problema 5.6

El Problema 5.6 se basa en datos del sistema de tratamiento de efluentes de una refinería de petróleo estudiado por Takama y col. (1980), se consideran las modificaciones que Kuo y Smith (1997) hicieron en los límites ambientales permitidos y las tasas de remoción de dos procesos de tratamiento con la intención de hacer el problema más realista. Aunque Takama y col. definen funciones de costos no lineales para cada proceso, algunos autores han abordado este problema como un problema de minimización de flujo total tratado, en la solución del Problema 5.6 se aborda también este caso, mientras que el Problema 5.7 considera el problema de minimización de costos. Abordaron este problema con la minimización de flujo total tratado como criterio de optimalidad Hernández-Suárez y col. (2004), Castro y col. (2007), Castro y col. (2009) y Ting y col. (2016). Castro y col. (2007) obtuvieron la solución óptima global de este problema con el resolutor GAMS/BARON, el problema se describe a continuación.

Tres corrientes efluentes producidas por una refinería de petróleo deben someterse a tratamiento para reducir las concentraciones de ácido sulfhídrico ( $H_2S$ ), aceite y sólidos suspendidos (SS) por medio de tres procesos con distintas tasas de remoción: una columna de absorción para agua contaminada (I), una unidad de centrifugación-sedimentación (II) y un separador API (III) hasta alcanzar una concentración en la descarga menor o igual a los límites ambientales permitidos para cada contaminante, que son 5, 20 y 100 ppm respectivamente. Los datos de las corrientes efluentes y los procesos de tratamiento se muestran en las Tablas 5.15 y 5.16.

Tabla 5.15 Datos de las corrientes efluentes de Problema 5.6.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración de contaminante (ppm)		
		$H_2S$	aceite	SS
1	13.1	390	10	250
2	32.7	16780	110	400
3	56.5	25	100	350

Tabla 5.16. Datos de las unidades de tratamiento en el Problema 5.6.

Proceso	Relación de remoción de los contaminantes (%)		
	$H_2S$	aceite	SS
Columna de Absorción (I)	99.9	0	0
Coagulación- Sedimentación(II)	90	70	98
Separador API (III)	0	70	50

Aplicando el algoritmo de multi-arranque estocástico a este problema se obtuvo convergencia a puntos factibles en 728 iteraciones, obteniéndose 13 soluciones distintas que se muestran en la Tabla 5.17, como se observa todas las soluciones obtenidas requieren el uso de la UT I, por sus alta tasa de remoción, para satisfacer el límite ambiental permitido de  $H_2S$  y las mejores soluciones utilizan las tres unidades de tratamiento. La mejor solución obtenida con la metodología empleada en este trabajo se muestra en la Fig. 5.7, que corresponde al óptimo global obtenido previamente por Castro y col. (2007).

## Capítulo 5. Resultados Obtenidos

Tabla 5.17 Principales características de los óptimos locales obtenidos para el Problema 5.6.

Solución	Flujo total tratado	Flujo tratado por unidad			Concentración en el punto de descarga			Frecuencia
		UT I	UT II	UT III	H <sub>2</sub> S	Aceite	SS	
1	173.47841	37.61912	103.15929	32.7	5	20	5.74	97
2	176.56122	37.71837	102.3	36.54286	5	20	5.81	144
3	179.88118	37.71837	102.3	39.86281	5	20	5.69	84
4	189.74096	32.7	157.04096	0	5	20	4.86	98
5	215.67535	84.13693	75.03842	56.5	5	20	66.75	31
6	217.18961	84.24303	71.14303	61.80355	5	20	58.43	41
7	224.17046	84.2676	43.86854	96.03432	5	20	100	31
8	227.98098	101.14146	89.2	37.63952	5	20	36.99	48
9	228.78085	101.14367	50.83814	76.79903	5	20	100	89
10	229.1587	101.14311	60.61661	67.39898	5	20	83.95	1
11	229.72053	83.42444	66.15198	80.14411	5	20	100	15
12	247.45633	101.08981	146.36652	0	5	20	35.96	47
13	370.05425	111.05425	0	259	5	13.27	100	2

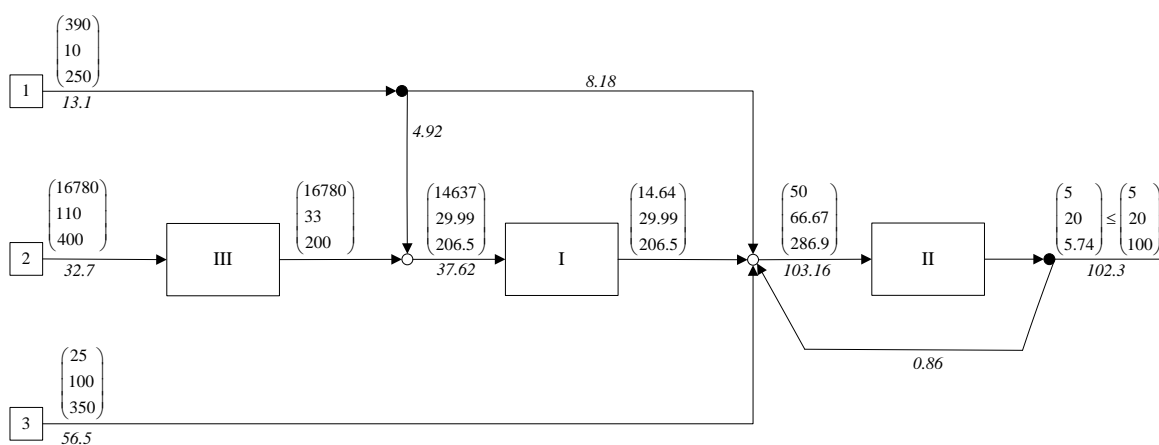


Fig. 5.7 Diseño óptimo del sistema de tratamiento de efluentes del Problema 5.6 con un flujo total tratado de 173.478 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

La mejor solución tiene una estructura en serie III-I-II y como se observa, en el proceso de tratamiento II, que remueve los tres contaminantes, hay una corriente de reciclo. Otros autores reportaron previamente esta estructura, Hernández-Suárez y col. (2004) al excluir las corrientes con reciclo de su superestructura obtienen un diseño con un arreglo similar pero con un flujo total tratado de 173.83 t/h.

### 5.8 Problema 5.7

En este problema se consideran los datos del Problema 5.6, mostrados en la Tabla 5.15 y la Tabla 5.16, pero se minimiza la función de costos con los datos económicos de Takama y col. (1980) y el factor de operación de la planta modificado por Kuo y Smith (1997), estos datos se muestran en la Tabla 5.18. También abordaron el problema minimizando esta función de costos Hernández-Suárez y col. (2004) y Shi y Liu (2011), quienes obtuvieron por medio de distintas metodologías el mismo diseño propuesto por Kuo y Smith (1997). Con el algoritmo de multi-arranque estocástico aplicado en este trabajo se obtuvo una solución que mejora las soluciones reportadas previamente en la literatura.

Tabla 5.18. Funciones de costos y datos económicos del Problema 5.7.

Proceso de tratamiento	Funciones de costos	
	Costo de capital (\$)	Costo de operación (\$/h)
I	$16800t^{0.7}$	$1.0t$
II	$12600t^{0.7}$	$0.0067 t$
III	$4800t^{0.7}$	0

*Tasa anual de retorno=10%*

*Horas de operación anuales de la planta=8600 h/año*

En la Fig.5.8 se muestra el diseño reportado por Kuo y Smith (1997), que al evaluar la función de costos se encontró que tiene un CTA de 390455.70 \$/año. Este diseño tiene un arreglo en paralelo para los procesos I y III, para finalmente tratar todos los efluentes en II, al igual que los diseños obtenidos por Hernández-Suárez y col. (2004) y Shi y Liu (2011).



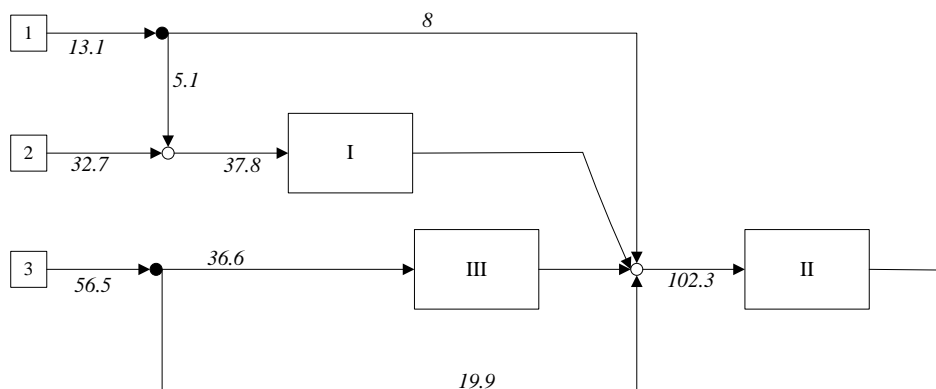


Fig. 5.8 Diseño propuesto por Kuo y Smith para el sistema de tratamiento del Problema 5.7, el cual tiene un CTA de 390455.70 \$/año. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas.

Al abordar este problema con la metodología de multi-arranque estocástico en dos fases se obtuvieron un total de 10 soluciones distintas que se muestran en la Tabla 5.19.

Tabla 5.19 Características de las soluciones obtenidas para el Problema 5.7.

Solución	CTA (\$/año)	Flujo tratado por unidad (t/h)			Concentraciones de Descarga (ppm)		
		I	II	III	H <sub>2</sub> S	aceite	SS
1	351968.07	32.7	145.75	6.89	5	20	4.8
2	352220.25	32.7	145.75	8.26	5	20	4.79
3	352718.24	32.7	157.11	0	5	20	4.63
4	790623.82	83.69	46.96	102.85	5	20	100
5	792406.76	83.83	42.02	130.24	5	16.45	100
6	818166.7	84.33	71.23	306.9	5	20	69.5
7	821063.87	84.22	84.22	306.9	5	20	63.1
8	821187.25	84.35	84.35	288.76	5	20	63.05
9	900648.81	90.04	306.9	0	5	20	71.66
10	1023952.03	111.05	0	259	5	13.27	100

En la mejor solución obtenida, que se muestra en la Fig.5.9, los costos se disminuyen considerablemente en comparación con el diseño de Kuo y Smith (1997) y los otros diseños reportados en la literatura, este diseño tiene un CTA de 351968.07 \$/año y se tratan 185.34 t/h de efluentes en un arreglo en serie.

El diseño de la Fig. 5.9 tiene una estructura muy distinta a la obtenida por Kuo y Smith, lo cual impacta en el costo del sistema; en el diseño de Kuo y Smith (1997), la corriente 2 con concentraciones altas de aceite y SS no es tratada en el proceso III, que remueve estos dos contaminantes, por lo que para alcanzar la remoción necesaria de éstos se trata un flujo considerablemente mayor, proveniente de la corriente 3, en este proceso, mientras que en el diseño

de la Fig. 5.9 la corriente 3 se trata únicamente en el proceso II. En ambos diseños la corriente 2 debe tratarse completamente en el proceso I por su alta concentración de  $H_2S$ . Al aumentarse el flujo tratado en el proceso II en el diseño óptimo obtenido en este trabajo en comparación con el diseño de Kuo y Smith (1997), se disminuye lo tratado en el proceso I, que es más costoso, ambos procesos remueven  $H_2S$ , que es el contaminante con mayor presencia en los efluentes.

La estructura que minimiza flujo total tratado (Fig. 5.7) tiene un costo de 388613.27 \$/año y aunque Castro y col. (2007), los primeros en obtenerla, no abordan el problema de minimización de costos, esta estructura también tiene un menor costo que las otras soluciones reportadas en la literatura. La mejor solución obtenida en este trabajo para la minimización de costos del sistema de tratamiento tiene un arreglo III-I-II en serie como la estructura de flujo mínimo, pero se notan algunas diferencias, en este caso aumenta significativamente el flujo en la corriente de reciclo del proceso II, con lo que aumenta el flujo tratado en este y en el sistema pero disminuyen los costos, pues el proceso de tratamiento II remueve simultáneamente los tres contaminantes y sus costos de capital y operación son menores que los del proceso I, necesario para remover  $H_2S$ . Además, la corriente 1 se trata solo en el proceso II y no en el I, más costoso.

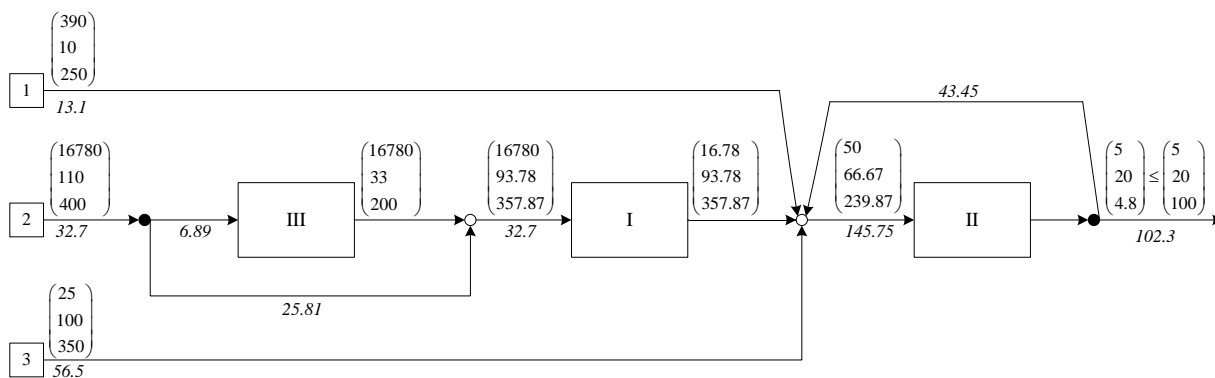


Fig. 5.9. Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.7, con un CTA de 351968.07 \$/año. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

En Fig. 5.10 se muestra la tercera mejor de las soluciones obtenidas, la cual tiene un costo ligeramente superior de 352718.23 \$/año pero utiliza solo dos unidades de tratamiento y tiene una menor descarga de sólidos suspendidos. Se observa que esta solución tiene un ramal con un flujo muy bajo, enviado de la corriente 2 al proceso II, con 0.03 t/h, eliminando este ramal que puede ser

impráctico para un sistema de tratamiento real, el sistema de tendría un costo de 352993.13 \$/año, ligeramente superior pero aún menor que otros diseños reportados en la literatura.

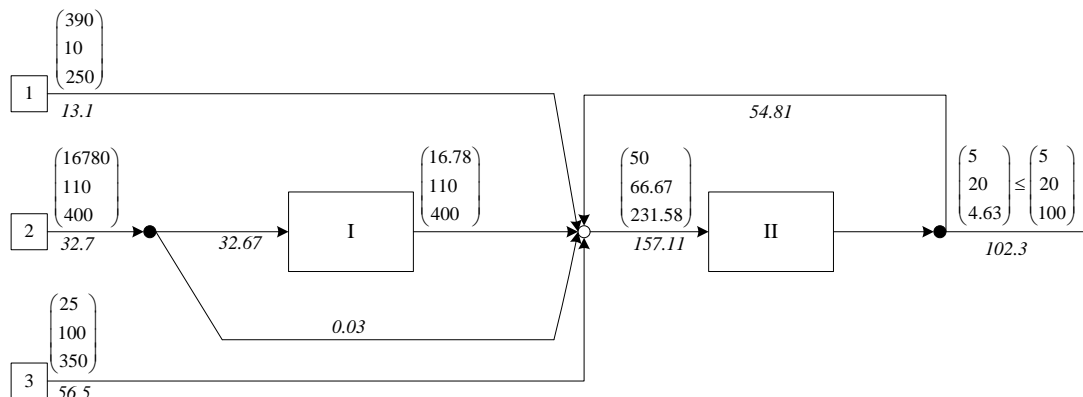


Fig. 5.10 Diseño alternativo del sistema de tratamiento del Problema 5.7, con un CTA de 352718.23 \$/año. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

## 5.9 Problema 5.8

Wang y Smith también proponen una versión modificada del problema estudiado por Takama y col. (1980), que corresponde al Problema 5.8 de la Tabla 5.1. Se abordó también en este trabajo con la minimización de flujo total tratado como criterio de optimalidad, como lo abordaron también Galán y Grossmann (1998), Martín -Sistac y Graells (2005), Castro y col. (2007), Castro y col. (2009) y Ting y col. (2016), reportando todos la misma solución.

En las Tablas 5.20 y 5.21 se muestran los datos de las corrientes efluentes y procesos de tratamiento del problema de Takama y col. (1980) modificados por Wang y Smith (1994). Los límites ambientales permitidos para los tres contaminantes son 2 ppm, 2 ppm y 5 ppm respectivamente.

Tabla 5.20 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.8.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración de contaminante (ppm)		
		H <sub>2</sub> S	aceite	SS
1	13.1	390	10	25
2	32.7	16780	110	40
3	56.5	25	100	35

Tabla 5.21 Tasas de remoción de los procesos de tratamiento del Problema 5.8.

Proceso	Relación de remoción de los contaminantes (%)		
	H <sub>2</sub> S	aceite	SS
Columna de Absorción (I)	99.9	0	0
Coagulación-Sedimentación(II)	90	90	97
Separador API (III)	0	95	20

Al abordar este problema con el algoritmo de multi-arranque estocástico propuesto en este trabajo se obtuvieron 6 soluciones distintas con convergencia a puntos factibles en 964 de las iteraciones. Las principales características de las soluciones obtenidas se muestran en la Tabla 5.22, en todas ellas los contaminantes A y B se descargan en sus límites ambientales permitidos, mientras que la concentración de SS en la corriente descargada varía según la estructura del sistema. Todas las soluciones obtenidas utilizan los tres procesos de tratamiento.

Tabla 5.22 Soluciones óptimas locales obtenidas para el Problema 5.8.

Flujo total tratado (t/h)	Flujo tratado por proceso (t/h)			$c_{e,SS}$ (ppm)	Frecuencia
	I	II	III		
229.70084	45.59547	102.3	81.80536	0.89	283
231.88085	45.8	101.56779	84.51306	1.08	131
260.37177	84.16282	102.3	73.90895	0.9	288
269.43171	96.52026	83.42026	89.4912	4.98	91
270.95758	102.18522	87.63867	81.13369	5	88
274.71201	101.92952	83.08503	89.69746	5	83

La mejor solución obtenida para este problema se muestra en la Fig. 5.11, que corresponde con la reportada por los otros autores y para la cual Castro y col. (2007) probaron optimalidad global con el resolutor GAMS/BARON.

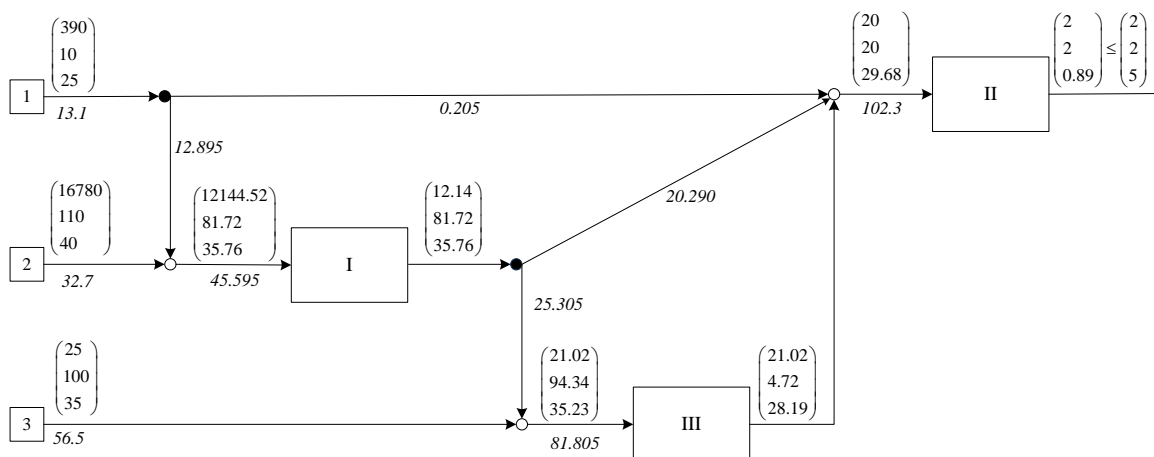


Fig. 5.11 Diseño alternativo del sistema de tratamiento del Problema 5.8, con un flujo total tratado de 229.7 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

### 5.10 Problema 5.9

Teles y col. (2012) abordaron el problema de optimización de redes de tratamiento y redes de uso eficiente de agua utilizando una técnica de desagregación multi-paramétrica. En su trabajo proponen varios problemas entre los que se encuentran el Problema 5.9 y el Problema 4.1, abordado en el Capítulo 4. En esta sección se describe y resuelve el Problema 5.9, que también fue abordado por Li y col. (2016) y Ting y col. (2016), quienes obtuvieron todos la misma solución, que de acuerdo a Ting y col. es el óptimo global de este problema de minimización de flujo total tratado con 1358.66 t/h.

En este problema debe diseñarse un sistema de tratamiento para 2 corrientes efluentes contaminadas con A y B como se muestra en la Tabla 5.23 para cumplir con los límites ambientales permitidos de 5 y 15 ppm, respectivamente. Se dispone de 6 procesos de tratamiento distintos que están sujetos a operar con concentraciones máximas permitidas en las corrientes de entrada y se muestran en la Tabla 5.24. Se desea obtener la combinación de ellos y la estructura que minimizan el flujo total tratado.

Tabla 5.23 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.9.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración (ppm)	
		A	B
1	150	210	700
2	270	110	140

Tabla 5.24 Datos de los procesos de tratamiento del Problema 5.9.

Proceso	Tasas de remoción (%)		Concentración máxima permitida (ppm)	
	A	B	A	B
I	90	0	45	200
II	70	90	110	90
III	0	80	190	50
IV	50	0	200	90
V	90	70	60	500
VI	20	40	20	190

Al utilizar el algoritmo de multi-arranque estocástico propuesto en este trabajo se obtienen 19 soluciones diferentes para este problema, las 6 mejores se muestran en la Tabla 5.25, en todas ellas los contaminantes A y B se descargan en sus límites ambientales permitidos. El mejor diseño obtenido se muestra en la Fig. 5.12 con un flujo total tratado de 1358.66 t/h, que corresponde al óptimo global del problema reportado por Ting y col. (2016), a diferencia de las demás soluciones presentadas en la Tabla 5.25, este diseño requiere de 2 y no de 3 procesos de tratamiento. Se observa también que el flujo es poco o nulo en los procesos IV y VI para todas las soluciones mostradas, ya que estos tienen tasas de remoción bajas para ambos contaminantes. Por otro lado el proceso de tratamiento V, con altas tasas de remoción para los dos contaminantes aparece en todas las mejores soluciones.

Tabla 5.25 Mejores soluciones obtenidas para el Problema 5.9.

Flujo total tratado (t/h)	Flujo tratado por unidad (t/h)					
	I	II	III	IV	V	VI
1358.66	0	332.19	0	0	1026.47	0
1400.92	313.30	520.96	0	0	566.67	0
1526.45	77.78	0	362.01	0	1086.67	0
1587.08	0	436.67	358.82	0	791.59	0
1588.67	0	0	362.01	140	1086.67	0
1636.57	0	0	270.59	0	1216.57	149.41

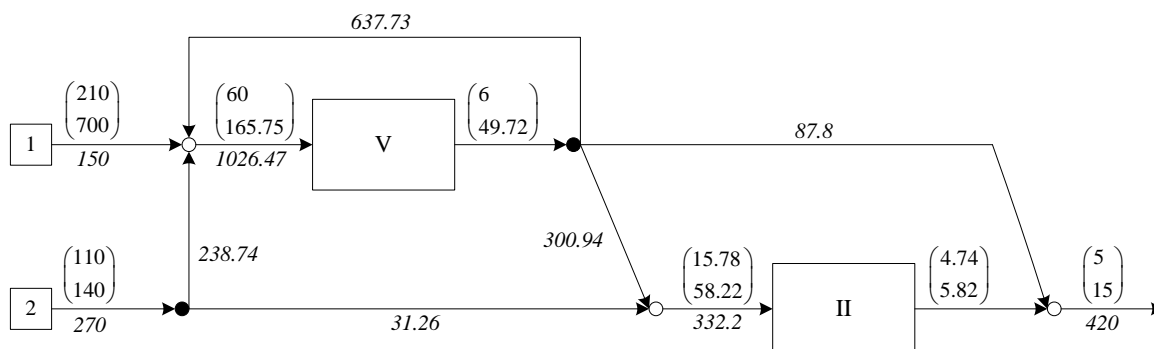


Fig. 5.12 Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.9, con un flujo total tratado de 1358.67 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

### 5.11 Problema 5.10

El problema 5.10 fue propuesto por Castro y col. (2007), quienes hicieron algunas modificaciones a un problema de Galán y Grossmann (1998), que también se aborda en este trabajo y corresponde al Problema 5.12 de la Tabla 5.1.

Debe diseñarse un sistema de tratamiento para las corrientes efluentes de la Tabla 5.26, de manera que los 6 contaminantes tengan una concentración en la descarga por debajo de 100 ppm. Los procesos de tratamiento disponibles se muestran en la Tabla 5.27 y los costos son proporcionales al flujo total tratado.

Tabla 5.26. Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.10.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración de contaminante (ppm)					
		A	B	C	D	E	F
1	19	1100	500	500	200	800	100
2	7	40		100	300	910	200
3	8	200	220	200	500	150	0
4	6	60	510	500	200	780	100
5	17	400	170	100	300	900	0

Tabla 5.27 Datos de los Procesos de tratamiento del Problema 5.10.

Proceso	Tasa de remoción (%)					
	A	B	C	D	E	F
I	99	0	0	0	0	0
II	0	99	0	0	0	0
III	0	0	99	0	0	0
IV	0	0	0	99	90	0
V	0	0	0	0	99	99

En la Tabla 5.28 se muestran los valores de flujo total tratado obtenidos por los distintos autores que han abordado este problema, Liu y col. (2013) y Li y col. (2015) utilizan reglas heurísticas basadas en el punto de pliegue, mientras que Ting y col. (2016) proponen relajaciones para la optimización global de la red de tratamiento.

Tabla 5.28. Soluciones reportadas en la literatura para el Problema 5.10.

Autor	Flujo tratado
Castro y col. (2007)	124.442 t/h
Castro y col. (2009)	124.359 t/h
Liu y col. (2013)	134.75 t/h
Li y col. (2015)	131.00 t/h
Ting y col. (2016)	124.442 t/h
Este trabajo	<b>124.359 t/h</b>

Castro y col. (2007) y Ting y col. (2016) obtuvieron un diseño en el que se tratan 124.442 t/h para el cual no pudieron probar optimalidad global en el tiempo de cómputo máximo establecido, 3600s, mientras que con el método propuesto en este trabajo se obtuvo un mejor resultado que el reportado por ambos en un tiempo de cómputo de 417.91 s. Castro y col. (2009) obtuvieron una solución con el mismo flujo total tratado que la obtenida en este trabajo pero con una estructura ligeramente distinta, la cual se muestra en la Fig. 5.14.

Aplicando el algoritmo de multi-arranque estocástico a este problema se convergió 496 veces a puntos factibles y se obtuvieron 84 soluciones diferentes, las 6 mejores y sus características principales se muestran en la Tabla 5.29, para las cuales varían las concentraciones de descarga de los contaminantes D y F. Como se muestra en la tabla, algunos diseños descartan el proceso de tratamiento V, que remueve E y F. La segunda mejor solución, en la que se emplean solo 4 procesos de tratamiento también representa una buena alternativa de diseño.

Tabla 5.29 Características de las mejores soluciones obtenidas para el Problema 5.10.

Solución	Flujo total tratado (t/h)	Flujos tratados por proceso (t/h)				
		I	II	III	IV	V
1	124.359	31.506	23.169	21.818	41.913	6.019
2	125	31.506	23.169	21.818	48.509	0
3	127.801	30.358	27.694	21.818	41.913	6.019
4	130.336	36.264	23.169	21.818	41.914	7.170
5	130.394	31.506	23.169	27.185	48.533	0
6	130.896	27.962	27.729	27.273	41.919	6.012



La mejor solución obtenida se muestra en la Fig. 5.13. En este diseño se tratan un total de 124.359 t/h en un arreglo en serie para los procesos II, III y I y finalmente una parte de los efluentes se trata en IV, que remueve D y E y otra en V, que remueve E y F. Cabe señalar que la solución obtenida en este trabajo es muy similar a la que reportan Castro y col. (2007), quienes obtienen la misma secuencia, con la única diferencia de que reportan una corriente de reciclo de 0.084 t /h en el proceso II, que comparando con el diseño obtenido en este trabajo, resulta ser innecesaria y solo aumenta el flujo tratado en este proceso.

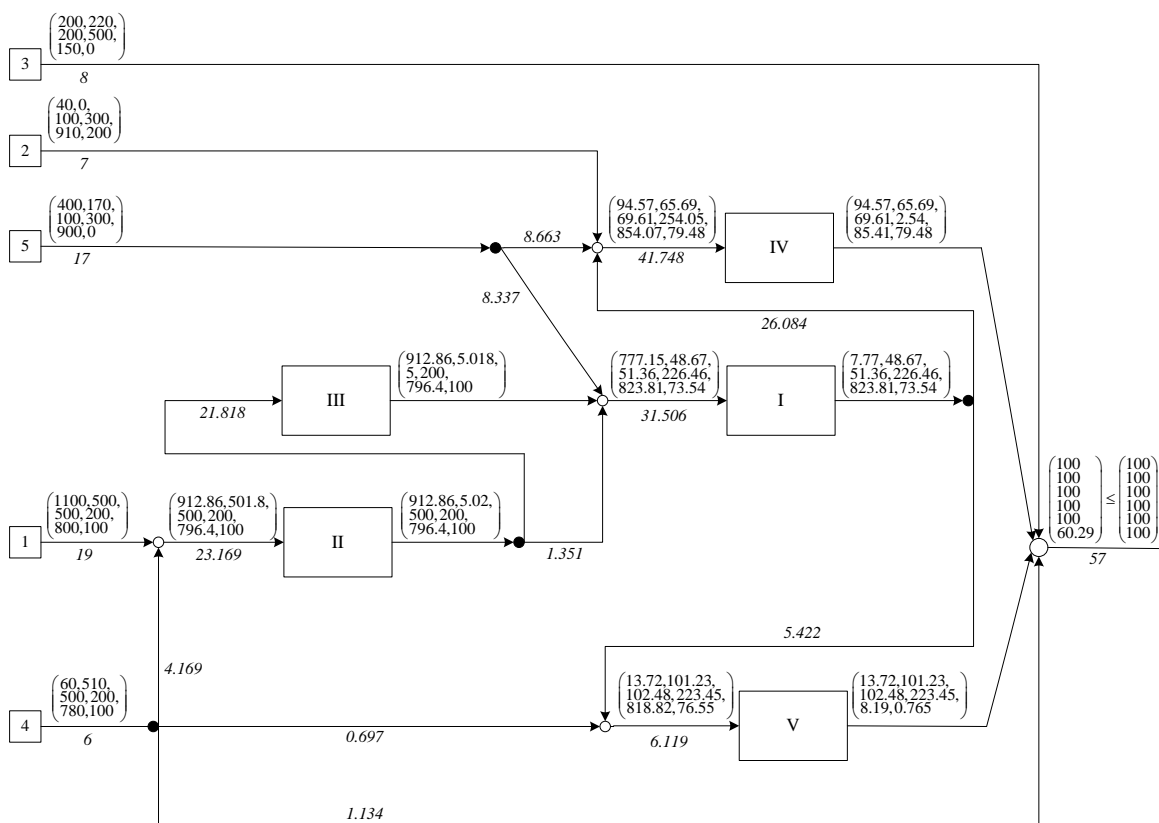


Fig. 5.13. Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.10, con un flujo total tratado de 124.359 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

Li y col. (2015) señalan que aunque en el diseño propuesto en su trabajo el flujo tratado se incrementa un 2.78% en comparación con el diseño de Castro y col. (2007), este tiene la ventaja de que no presenta corrientes de poco flujo (<1.5 t/h), que pueden ser imprácticas de aplicar en un sistema de tratamiento real. Como se observa en la Fig. 5.13 el diseño propuesto en este trabajo presenta tres corrientes con menos de 1.5 t/h.

En la Fig. 5.14 se muestra el diseño obtenido por Castro y col. (2009), con el mismo flujo total tratado y una estructura muy similar a la obtenida en este trabajo. En este diseño, el proceso III precede al proceso II, la corriente 1 es tratada de manera parcial en III y completamente en II y el flujo tratado en III se envía por completo a II, a diferencia del diseño de la Fig.5.13.

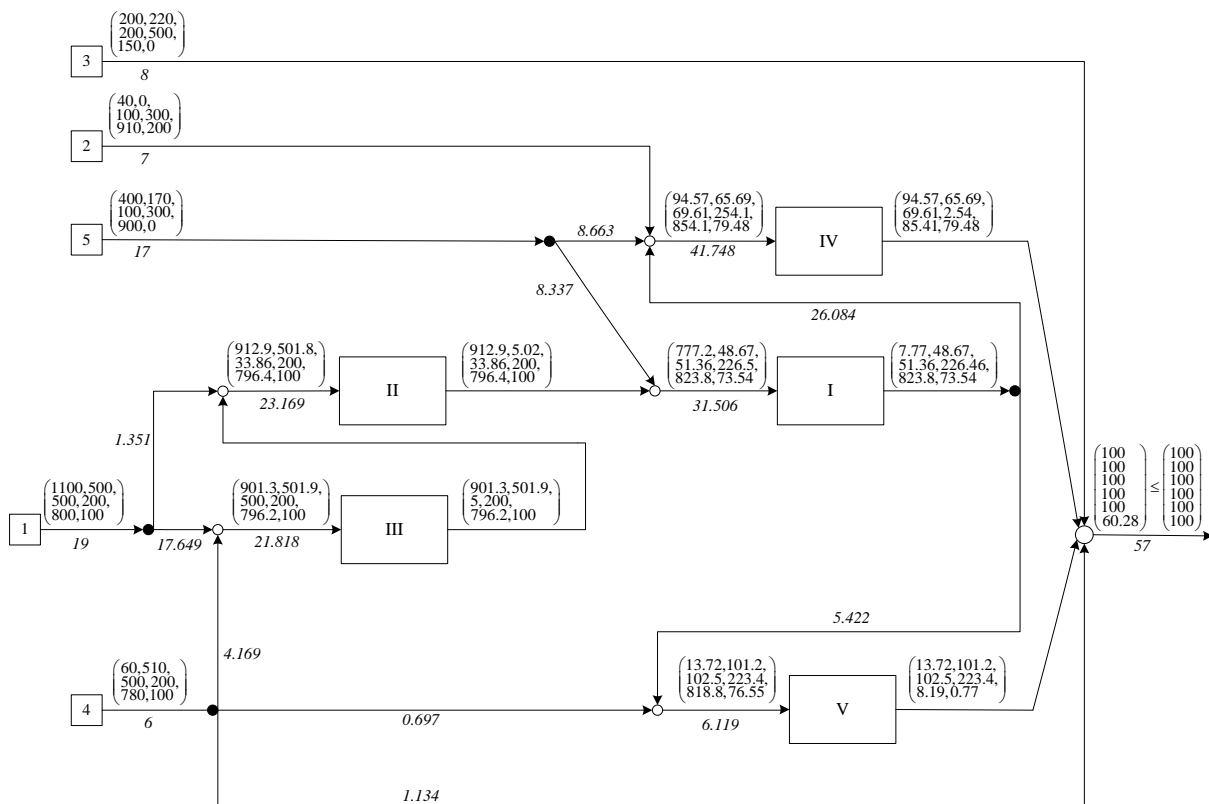


Fig. 5.14 Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.10 reportado por Castro y col. (2009), con un flujo total tratado de 124.359 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

## 5.12 Problema 5.11

El Problema 5.11, propuesto por Galán y Grossmann (1999), ha sido abordado también por Liu y col. (2013) y Li y col. (2015). Con el método propuesto se obtiene una mejor solución para este problema que las reportadas previamente en la literatura.

En este problema, las 15 corrientes de la Tabla 5.30 pueden tratarse de manera total o parcial en los 5 procesos de tratamiento cuyas tasas de remoción se muestran en la Tabla 5.31, para los cuales los costos son proporcionales al flujo tratado. Los límites ambientales de descarga son 100 g/m<sup>3</sup> (o ppm) para todos los contaminantes.

Tabla 5.30. Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.11.

Corriente	Flujo (m <sup>3</sup> /s)	Concentración(ppm)				
		A	B	C	D	E
1	36	100	50	350	0	70
2	24	600	800	1500	0	910
3	15	900	0	600	150	230
4	25	10	10	100	3000	850
5	18	40	170	0	500	690
6	35	0	1100	0	200	340
7	9	120	10	500	2000	70
8	2	370	20	100	30	690
9	3	900	350	200	80	230
10	23	250	270	90	0	580
11	89	0	1190	60	230	370
12	1	0	0	20	800	100
13	5	2000	600	340	0	30
14	41	0	5	100	600	40
15	8	1000	1510	270	150	220

Tabla 5.31. Datos de los procesos de tratamiento del Problema 5.11.

Número de Proceso	Relación de remoción (%)				
	A	B	C	D	E
I	40	0	98	0	0
II	90	50	0	0	0
III	0	0	0	0	90
IV	0	0	0	99	90
V	0	90	0	0	99

Aplicando un enfoque de multi-arranque estocástico para la solución de este problema se obtiene convergencia a puntos factibles en 736 iteraciones con 9 soluciones diferentes que se muestran en la Tabla 5.32, en ninguna de ellas se utiliza el proceso de tratamiento III, que como se observa en la Tabla 5.31 solo remueve el contaminante E, que puede ser removido también con los procesos IV y V, que además remueven D y B respectivamente. En la mejor solución obtenida se tratan un total de 321.56 m<sup>3</sup>/s, lo que representa una reducción considerable en el flujo total tratado en comparación con las soluciones reportadas en la literatura, que se muestran en la Tabla 5.33.

Tabla 5.32 Soluciones obtenidas para el Problema 5.11 y sus principales características

Flujo total tratado (t/h)	Frecuencia	Flujo tratado por unidad (t/h)				
		UT I	UT II	UT III	UT IV	UT V
321.56452	239	50.52101	15.52716	0	92.1697	163.34666
322.9891	227	50.32182	11.80658	0	92.1697	168.691
323.33242	38	51.11024	10.34862	0	92.1697	169.70386
326.77556	100	48.71667	28.29475	0	92.47475	157.28938
370.74051	69	106.0936	0	0	92.1697	172.47721
399.84927	16	129.01577	24.09206	0	92.1697	154.57175
400.64587	18	133.86873	24.73223	0	92.1697	149.87521
547.57552	24	297.26036	0	0	92.1697	158.14545
707.62489	5	343.69138	0	0	158.07424	205.85926

Tabla 5.33 Soluciones reportadas en la literatura para el Problema 5.11

Autor	Flujo tratado
Galán y Grossmann (1999)	440 m <sup>3</sup> /s
Liu y col. (2013)	381.19 m <sup>3</sup> /s
Li y col. (2015)	337.64 m <sup>3</sup> /s
Este trabajo	<b>321.56 m<sup>3</sup>/s</b>

El mejor diseño obtenido se muestra en la Fig. 5.14. Las corrientes 1, 8 y 10 son enviadas directamente a la descarga, el resto de las corrientes son tratadas total o parcialmente. Los efluentes se tratan de manera paralela en las unidades I y IV, el flujo tratado en la unidad IV se envía directo a la descarga, mientras que del flujo tratado en la unidad I, 0.13 m<sup>3</sup>/s se envían a la descarga y el resto se tratan en V y II, nuevamente de manera paralela. El contaminante F se descarga por debajo del límite ambiental permitido.

En la Fig. 5.15 se muestra también el diseño del sistema de tratamiento reportado por Li y col. (2015) para este problema. Como se observa, este diseño tampoco requiere de la unidad III y, al igual que en el diseño obtenido en este trabajo, la unidad IV se trata en paralelo con respecto a las unidades I, II y V, pero en este caso estos procesos se ejecutan en un arreglo en serie en ese orden, tratando un mayor volumen de efluente en todos ellos.

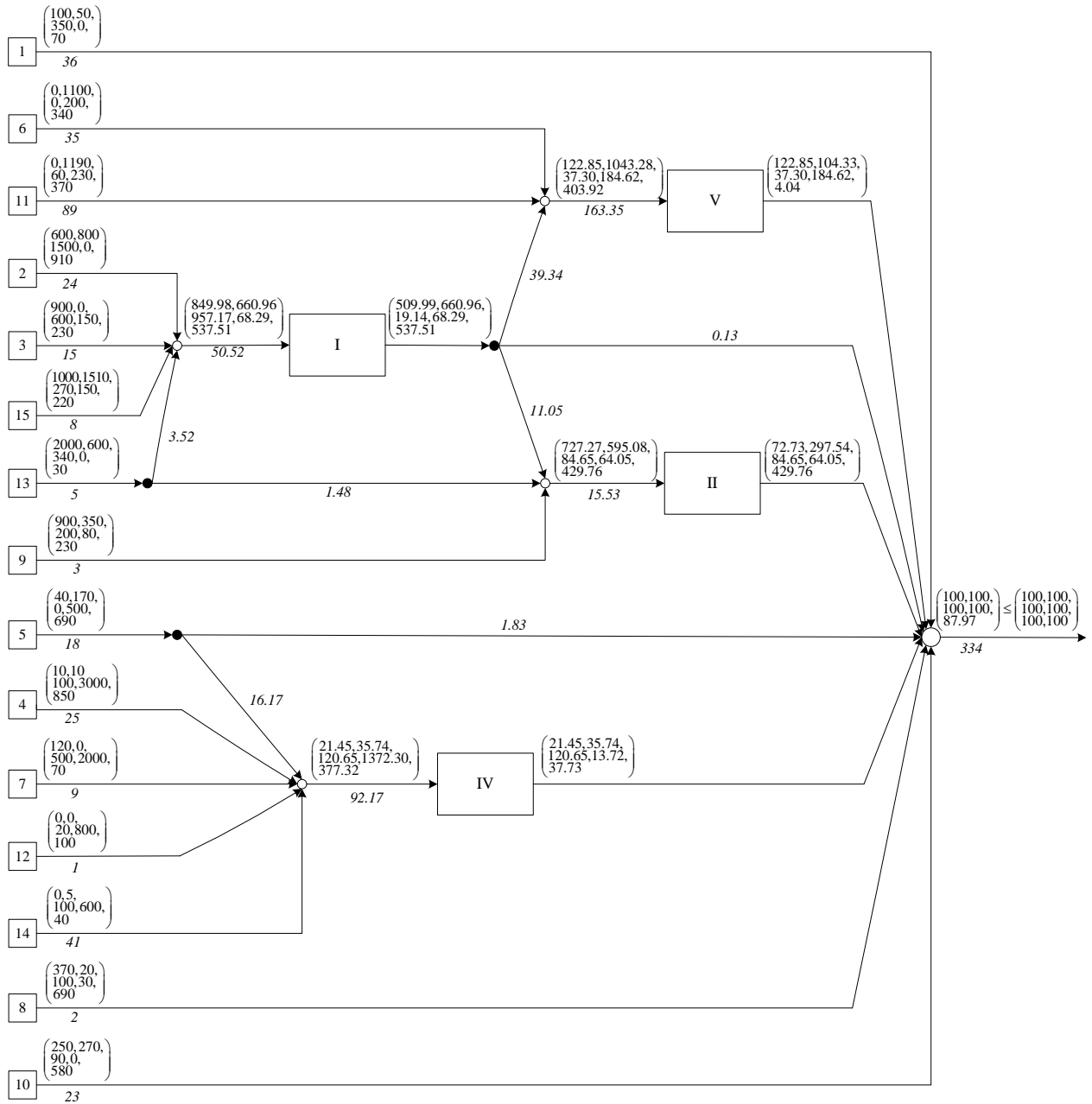


Fig. 5.15 Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.11, con un flujo total tratado de  $321.56 \text{ m}^3/\text{s}$ . Se muestran los flujos de las corrientes efluentes ( $\text{m}^3/\text{s}$ ) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

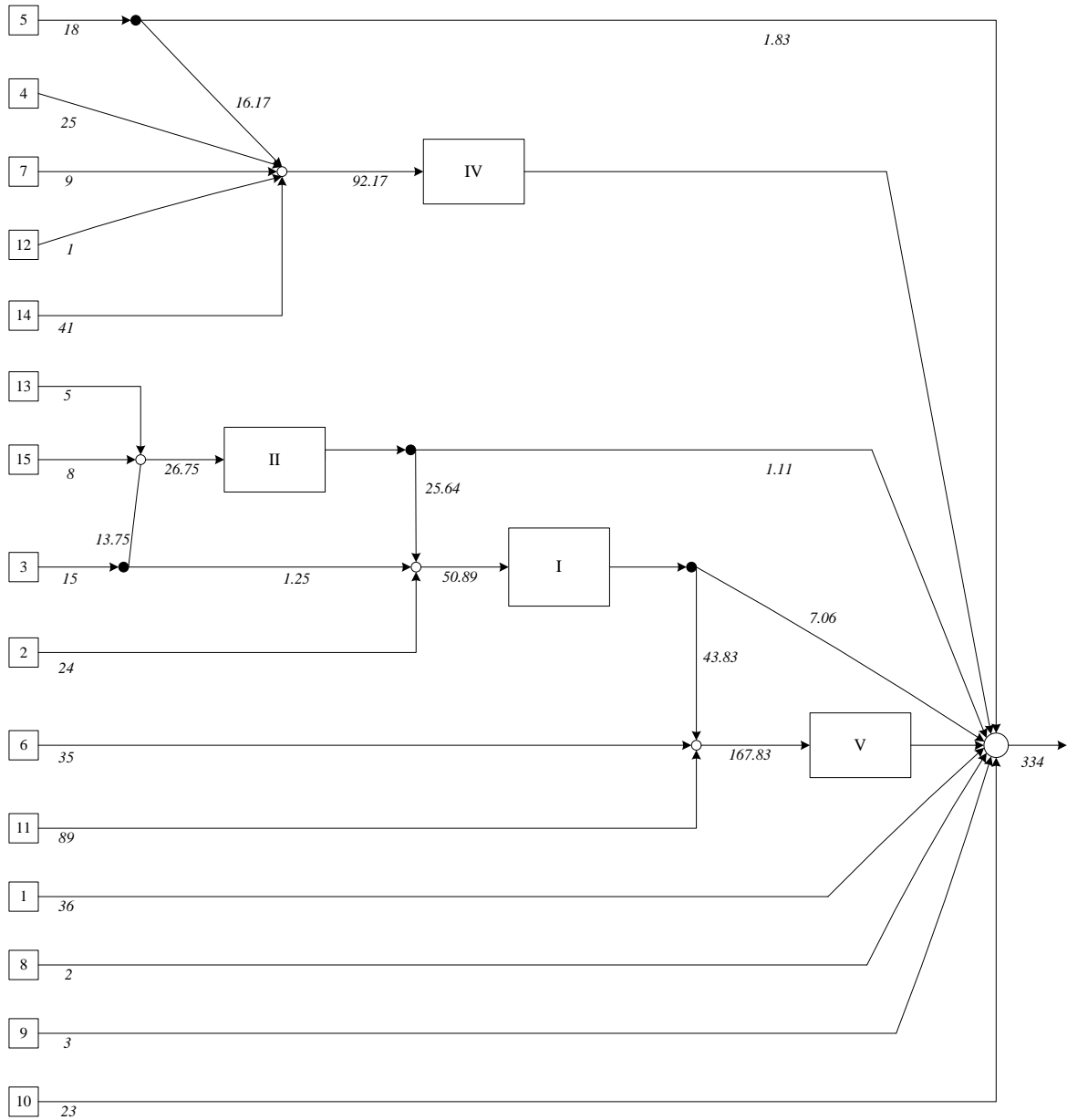


Fig. 5.16 Diseño del sistema de tratamiento del Problema 5.11 reportado por Li y col. (2015), con un flujo total tratado de 337.64 m<sup>3</sup>/s. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (m<sup>3</sup>/s) en cursivas.

### 5.13 Problema 5.12.

El Problema 5.12 propuesto por Galán y Grossmann (1998) es el problema con mayor número de variables y restricciones abordado en este trabajo.

Debe diseñarse un sistema de tratamiento que remueva los contaminantes A, B, C, D, E y F de las doce corrientes efluentes cuyos datos se muestran en la Tabla 5.34, de manera que en la corriente de descarga todos estos contaminantes tengan concentraciones menores a 100 ppm. Se dispone de cinco unidades de tratamiento con las características mostradas previamente en la Tabla 5.27 del Problema 5.10 y los costos del sistema de tratamiento son proporcionales al flujo total tratado.

Tabla 5.34 Datos de las corrientes efluentes del Problema 5.12.

Corriente	Flujo (t/h)	Concentración de contaminantes (ppm)					
		A	B	C	D	E	F
1	19	1100	500	500	200	800	100
2	7	40	0	100	300	910	200
3	8	200	220	200	500	150	0
4	6	60	510	500	200	780	100
5	17	400	170	100	300	900	0
6	12	0	0	0	500	140	0
7	2	610	310	500	2000	830	0
8	24	370	120	100	300	950	300
9	15	290	350	200	500	0	0
10	1	0	0	200	500	100	0
11	33	10	50	1	60	20	30
12	6	300	10	20	150	120	270

Aplicando la técnica de multi-arranque estocástico a este problema se tiene convergencia a puntos factibles en 633 iteraciones y se obtienen 77 soluciones diferentes con valores de flujo total tratado entre 176.19 t/h y 261.058 t/h, las 12 mejores (menor flujo total tratado) se muestran en la Tabla 5.35. Como se observa en las mejores soluciones no se utiliza la UT V, que remueve los contaminantes E y F, pues el contaminante E también puede ser removido en la UT IV y respecto al contaminante F, la mayoría de las corrientes tienen concentraciones de este contaminante por debajo de las 100 ppm que al mezclarse generan una corriente con solo 91.4 ppm de F, menor al límite ambiental permitido, sin necesidad de recibir tratamiento. La mejor solución obtenida, en la cual se tratan 176.19 t/h de efluente, se muestra en la Fig. 5.16 y se obtuvo en 92 de las 1000 iteraciones realizadas. Este diseño es el mejor reportado en la literatura y fue obtenido previamente por Hernández-Suárez (2004), mientras que Galán y Grossmann (1998), los autores del problema reportan un flujo total tratado de 191.61 t/h en la solución obtenida por ellos.

Tabla 5.35 Soluciones obtenidas para el Problema 5.12 y sus principales características.

Flujo total tratado (t/h)	Frecuencia	Flujo tratado por unidad (t/h)				
		I	II	III	IV	V
176.19173	92	47.54187	28.65137	16.67273	83.32576	0
177.32594	54	50.28696	26.25094	16.67273	84.11531	0
183.05149	31	45.88752	35.75601	16.67273	84.73523	0
183.80535	33	48.06339	34.31085	16.67273	84.75837	0
184.88394	48	47.54187	28.65137	24.22651	84.46418	0
187.25594	38	45.88752	41.79181	16.67273	82.90388	0
188.32548	1	47.18482	38.46919	16.67273	77.97132	8.02742
188.70388	3	57.86159	28.4228	16.67273	75.95152	9.79525
188.95631	2	59.00131	28.4228	16.67273	75.95152	8.90797
189.25865	2	58.43194	25.67994	16.67273	72.35152	16.12252
189.52779	1	58.43194	25.67994	16.94188	72.35152	16.12252
189.70943	23	47.54187	28.65137	30.15457	83.36161	0

Como se observa en la Fig. 5.16, en el mejor diseño se emplean cuatro procesos de tratamiento en un arreglo en serie III-II-I-IV, en el cual solo son tratadas algunas corrientes, de manera total o parcial.



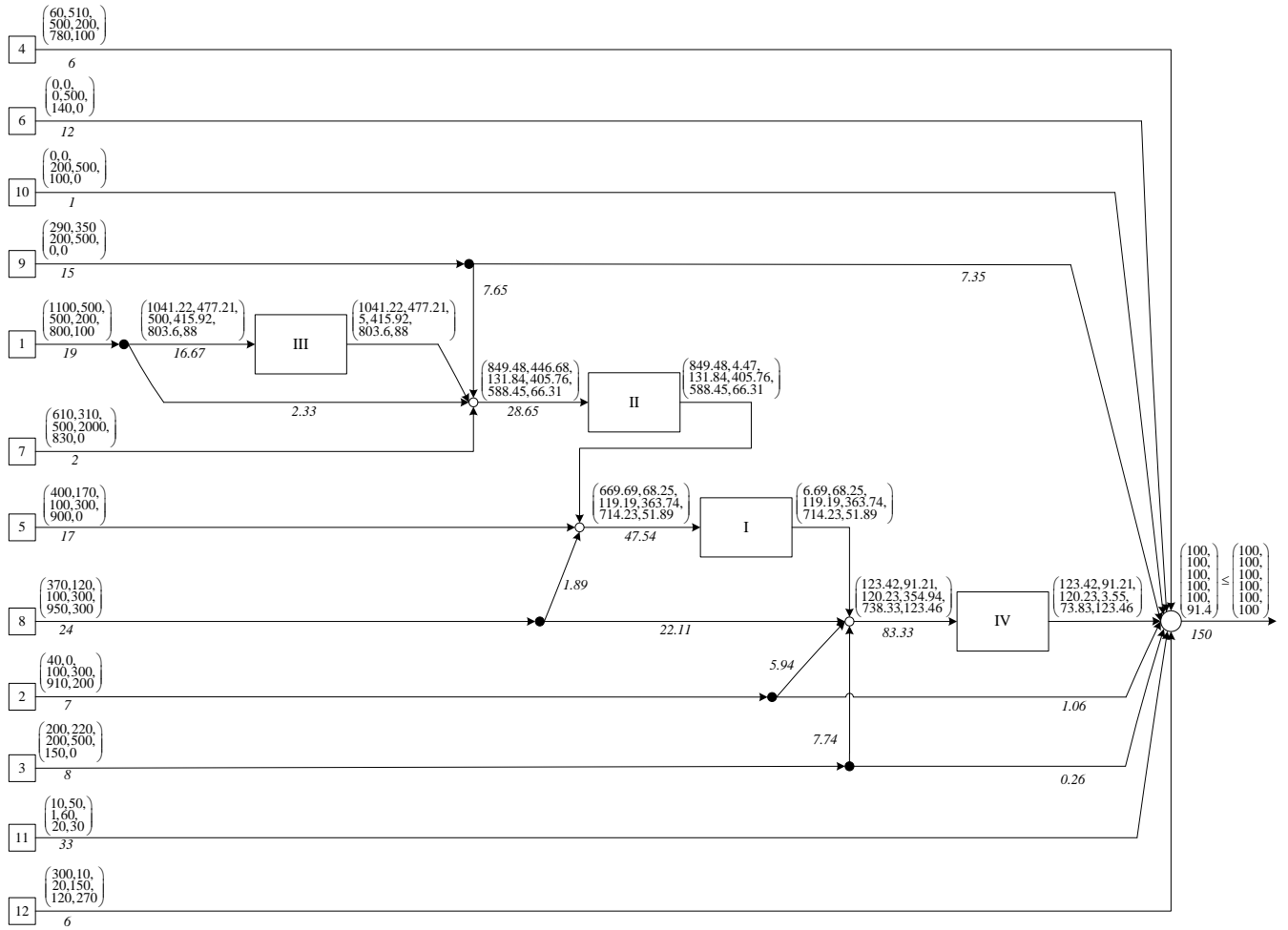


Fig. 5.17 Diseño óptimo del sistema de tratamiento del Problema 5.12, con un flujo total tratado de 176.19 t/h. Se muestran los flujos de las corrientes efluentes (t/h) en cursivas y los vectores de concentraciones (ppm) con fuente normal.

### 5. 13 Resumen de Resultados

Al aplicar el algoritmo de multi-arranque estocástico se obtuvieron buenos resultados en todos los problemas abordados, para cada uno de ellos se reproducen las mejores soluciones reportadas en la literatura con distintas metodologías de optimización, en tiempos de cómputo no demasiado grandes (véase Tabla 5.37). Para diez de las soluciones obtenidas, otros autores han probado optimalidad global previamente, lo que proporciona evidencia de que, aunque el método posee elementos aleatorios y no garantiza optimalidad global, en muchos casos si se obtienen óptimos globales; además con la metodología propuesta se obtuvieron mejores soluciones que cualquiera reportada en la literatura para dos de los problemas abordados.

En la Tabla 5.36 se muestran las mejores soluciones obtenidas para cada problema y se comparan con las mejores soluciones reportadas previamente en la literatura. Se resaltan en negrilla las soluciones obtenidas en este trabajo con las que se disminuye CTA o flujo total tratado, según corresponda, en comparación con la mejor solución reportada previamente en la literatura. Se observa también que para los problemas abordados las mejores soluciones aparecen desde las primeras iteraciones en la mayoría de los casos.

Tabla 5.36 Resultados obtenidos y comparación con la literatura.

Problema	Mejor sol. reportada en la literatura (t/h)	Autor de la mejor solución reportada en la literatura	Mejor sol. obtenida en este trabajo (t/h)	Iteración**
5.1	59.798*	Galán y Grossmann (1998)	59.798	1
5.2	107.012(\$/año)	Zamora-Mata y col. (2004)	107.012 (M\$/año)	1 (222)
5.3	130.703*	Galán y Grossmann (1998)	130.703	1
3.3	99.495*	Kuo y Smith (1997)	99.495	1
5.4	89.836*	Galán y Grossmann (1998)	89.836	4
3.4	161.879	Hernández-Suárez y col. (2008)	161.879	1
5.5	238.127	Hernández-Suárez y col. (2004)	238.127	5
3.2	80.779*	Kuo y Smith (1997)	80.779	17
5.6	173.478*	Castro y col. (2007)	173.478	29
5.7	388613.27 (\$/año)	Castro y col. (2007)	<b>351968.69(\$/año)</b>	1
5.8	229.701*	Galán y Grossmann(1998)	229.701	15
4.2	109.401*	Castro y col.(2007)	109.401	39
4.1	513.001*	Teles y col.(2012)	513.001	1
5.9	1358.663*	Teles y col.(2012)	1358.663	1
5.10	124.359	Castro y col. (2009)	124.359	13
5.11	337.64	Li y col. (2015)	<b>321.565</b>	11
5.12	176.19	Hernández-Suárez (2004)	176.19	9

\*Soluciones obtenidas con optimización global determinista. \*\*Iteración en que se obtuvo por primera vez la mejor solución. Entre paréntesis la iteración en que se obtuvo la mejor solución del Problema 5.2

En la Tabla 5.37 se muestran detalles de las 1000 iteraciones realizadas para cada problema, como la cantidad de veces que se convergió a una solución factible, la cantidad de óptimos locales distintos obtenidos y el tiempo de cómputo requerido. Se observa que el tiempo de cómputo tiende a aumentar conforme aumenta el tamaño del problema.

Tabla 5.37 Tiempo de cómputo, cantidad de puntos factibles y óptimos locales obtenidos para cada problema abordado con el algoritmo de multi-arranque estocástico en 1000 iteraciones.

Problema	Convergencia a Puntos Factibles	Óptimos locales obtenidos	Tiempo de Cómputo (s)
5.1	999	1	49.027
5.2	1000	75	30.927
5.3	998	2	53.637
3.3	995	1	49.813
5.4	781	2	58.4023
3.4	1000	1	48.953
5.5	826	2	83.188
3.2	110	6	83.877
5.6	728	13	80.223
5.7	683	10	78.023
5.8	256	6	81.070
4.2	664	9	211.66
4.1	989	22	130.27
5.9	987	19	196.895
5.10	499	65	417.9141
5.11	736	9	459.6289
5.12	633	19	623.3594

En la mayoría de los problemas se obtuvo más de una solución factible y en algunos casos la cantidad de óptimos locales identificados, en los cuales podrían quedar atrapados otros métodos de solución, es considerable. Como se observó en varios de los problemas abordados, la mejor solución no siempre es la que se obtiene con mayor frecuencia y además algunos puntos de arranque no convergen a soluciones factibles. El método resultó ser efectivo para obtener buenas soluciones cuando se realizan suficientes iteraciones y además de esto, si se conserva información de las diferentes soluciones obtenidas se tienen varias alternativas para el diseño del sistema de tratamiento, de entre las cuales se puede elegir considerando otros factores además del costo del sistema, como la estructura, por ejemplo.

---

## Capítulo 6

# CONCLUSIONES

---

### 6.1 Introducción

En este trabajo se propuso una metodología para el diseño de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes que utiliza un enfoque de optimización con multi-arranque estocástico, junto con la metodología se propone un modelo general de programación no lineal para la formulación matemática de este tipo de problemas.

El modelo desarrollado, que es una extensión del modelo propuesto en la tesis doctoral de Hernández-Suárez (2004), se caracteriza por emplear flujos totales, flujos másicos de contaminante y fracciones de división como variables en los balances de materia y puede aplicarse a problemas con una o varias unidades de tratamiento, uno o más contaminantes y múltiples corrientes efluentes de proceso. Además, el modelo permite la incorporación de restricciones particulares como flujos o concentraciones máximas o fijas en la entrada y salida de las unidades de tratamiento cuando así se requiere por la forma en que opera un proceso. Un aspecto importante de este modelo es que considera la inclusión de corrientes de recirculación y reciclaje en la topología del sistema, lo cual en algunos casos puede ser útil para disminuir costos, lograr factibilidad o cumplir con restricciones de proceso.

El enfoque propuesto para resolver el modelo desarrollado u otro modelo de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes no ha sido aplicado anteriormente en la literatura a la solución del problema de síntesis abordado. En este trabajo se aplica un algoritmo de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases, una fase global, que genera un punto de arranque aleatorio y una fase de optimización local con PNL que parte del punto inicial generado; el método fue propuesto por Nuñez-Serna y Zamora (2016) para la optimización de redes de intercambio de calor. Mientras el multi-arranque busca una exploración amplia del espacio de solución y, si se realizan las iteraciones suficientes, una cantidad considerable de puntos en diferentes regiones serán explorados, con la optimización local se consigue que cada una de las soluciones obtenidas sea la mejor en la vecindad del punto de inicialización aleatorio generado.

Aplicando esta metodología se busca obtener óptimos globales o soluciones muy cercanas a éstos en tiempos de cómputo prácticos, menores que los que se requieren para obtener un óptimo global con métodos determinísticos por ejemplo, que emplean la mayor parte del tiempo probando optimalidad global para una solución, más que en obtener esta solución (Galán y Grossmann, 1998).

El modelo y la metodología se probaron en 17 problemas de la literatura, de diferentes autores y con diferente cantidad de variables y restricciones, encontrándose buenos resultados. Con la metodología utilizada es altamente probable obtener óptimos globales o soluciones de alta calidad en tiempos de cómputo muy razonables y para dos de los problemas abordados se obtuvieron soluciones que mejoran las soluciones reportadas previamente en la literatura con otras metodologías.

### 6.2 Contribuciones del proyecto

Las principales contribuciones de este proyecto son:

1. El desarrollo y validación de un modelo de PNL para la síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes, para el cual se incluyen expresiones de restricciones de proceso adicionales y un conjunto de cotas útiles de las variables para la solución del modelo.
2. La aplicación de la técnica de multi-arranque estocástico a la solución de problemas de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes. Debido a los términos bilineales que aparecen en algunas de las restricciones de los modelos con que se formula este problema, que en el modelo propuesto son las multiplicaciones de las fracciones de división y los flujos que salen de los divisores después de las unidades de tratamiento, obtener una solución óptima global es muy complicado. En ocasiones los algoritmos de solución tienen dificultades para obtener una solución factible y muchas veces terminan con soluciones locales subóptimas. Si bien las técnicas de optimización global determinista realizan una exploración minuciosa de la región factible y garantizan la obtención de un óptimo global si lo hay, consumen una cantidad considerable de tiempo computacional, lo que las vuelve imprácticas en muchos casos. Por otro lado, los algoritmos de PNL tienen una fuerte dependencia con el punto de arranque y obtienen una solución óptima local, que muy probablemente no es un óptimo global y puede incluso ser una solución muy pobre. De acuerdo con los resultados obtenidos en este trabajo, cada problema suele presentar más de un óptimo local en el espacio de solución factible y en algunos casos existe una cantidad importante de óptimos locales en los que estos algoritmos pueden terminar. Algunas

propuestas para abordar este problema, como la de Galán y Grossmann (1998) o la de Castro y col. (2007), se enfocan en generar varios buenos puntos de arranque para los algoritmos de PNL a partir de relajaciones de PL. En este trabajo se utiliza una metodología en la que se generan múltiples puntos de arranque de manera aleatoria, y si bien no puede garantizar optimalidad global, realiza una amplia exploración de la región factible en un tiempo computacional razonable, proporcionando para los problemas abordados una solución que es la mejor en una vecindad y como se puede observar en los resultados obtenidos, es también generalmente mejor que otras tantas soluciones óptimas locales y puede ser un óptimo global, incrementándose la probabilidad de que lo sea conforme se aumenta el número de iteraciones realizadas. Por otro lado, si se guardan las soluciones obtenidas durante el transcurso de las iteraciones se tienen además varias opciones de diseño a considerar si deben tomarse en cuenta otros factores además del costo del sistema.

3. La obtención de soluciones mejores que las existentes para dos problemas de la literatura. Para los problemas 5.7 y 5.11 se obtuvieron diseños que disminuyen el costo o el flujo total tratado, según el caso, comparado con cualquier otra solución que se haya reportado en la literatura por distintas metodologías.

### 6.3 Conclusiones generales

Los resultados obtenidos demuestran que el modelo PNL-R puede representar adecuadamente una variedad de problemas de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes y puede ser resuelto de manera eficiente con la metodología propuesta en este trabajo.

Las corrientes de reciclaje, ignoradas en algunos modelos y metodologías de la literatura, son útiles en ocasiones para disminuir el costo total de un sistema o lograr factibilidad, como ya señalaron Hernández-Suárez y col. (2008), quienes estudian la reconfiguración de sistemas de tratamiento de una sola unidad. En el caso de sistemas de tratamiento más complejos, con más unidades de tratamiento, como la mayoría de los abordados en este trabajo, las corrientes de reciclaje pueden resultar útiles en algunas de las unidades de tratamiento; cinco de las mejores soluciones obtenidas incluyen corrientes de reciclaje, éstas permiten tratar una mayor cantidad de efluente en una determinada unidad de tratamiento con tasas de remoción más altas o menor costo que otras y así disminuir los costos totales del sistema, como en el caso del Problema 5.7, o podrían también ser útiles para lograr factibilidad cuando esto no es posible usando las unidades de tratamiento disponibles. Sin embargo, precisamente porque las corrientes de reciclaje incrementan el flujo tratado

en las unidades de tratamiento, debe analizarse cuidadosamente si el incluirlas es conveniente o no. Las corrientes de reciclaje también pueden ser utilizadas para mezclarse con las corrientes de agua de proceso que recién ingresan a la unidad y generar corrientes que cumplan con las restricciones de concentración a la entrada de las unidades de tratamiento como en los problemas 4.1 y 5.9. Las corrientes de recirculación, por otro lado, no aparecieron en ninguna de las soluciones obtenidas y en general complican la estructura de una red, sin embargo podrían ser útiles en otros casos para cumplir con especificaciones de concentración en las unidades de tratamiento.

De acuerdo con los resultados obtenidos en este trabajo, el enfoque de multi-arranque estocástico es muy efectivo para abordar el problema de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido de efluentes. En todos los casos abordados, se obtuvieron las mejores soluciones reportadas para cada uno de los problemas con distintas metodologías, algunas con un fundamento más complicado, para diez de las soluciones otros autores probaron anteriormente que son óptimos globales y en dos casos incluso se obtuvieron mejores soluciones que las obtenidas con otros métodos. Como se nota en la Tabla 5.36, las mejores soluciones se obtuvieron dentro de las primeras cuarenta iteraciones para todos los problemas, lo que proporciona evidencia de que si bien con las 1000 iteraciones realizadas se incrementa la probabilidad de que las soluciones obtenidas sean óptimos globales, en los problemas abordados y probablemente en problemas de tamaño similar basta con menos de 100 iteraciones para obtener soluciones de alta calidad, es decir se requiere menos tiempo de cómputo y, por otro lado, la metodología tiene potencial para ser aplicada en problemas más complejos.

### **6.4 Observaciones y Trabajo a futuro**

A continuación se discuten brevemente otros aspectos del problema estudiado, algunos de los cuales pueden tenerse en cuenta para investigaciones a futuro que profundicen en el tema.

En el caso del modelo PNL-R, la complejidad de los problemas y el tiempo de cómputo requerido para resolverlos se incrementan principalmente con el aumento en el número de unidades de tratamiento, como señalaron Hernández-Suárez y col. (2004). El incremento en la cantidad de unidades de tratamiento, contaminantes y corrientes de efluentes que ingresan al sistema de tratamiento se traduce en un aumento en el número de variables y ecuaciones que se necesitan para formular un problema. La complejidad del problema se ve afectada principalmente por el aumento en el número de unidades de tratamiento, en segundo término por la cantidad de contaminantes presentes y la cantidad de corrientes afecta muy poco la formulación del problema. La adición de una nueva corriente al sistema genera solo dos variables nuevas y una ecuación, mientras que por

cada contaminante que el sistema debe remover se generan 5 variables y 6 restricciones y la cantidad de variables y ecuaciones necesarias aumenta considerablemente con la adición de cada proceso de tratamiento en el sistema en comparación con la de una nueva corriente o un nuevo contaminante, pues además las unidades de tratamiento generan variables combinatorias como son las fracciones de división y los flujos entre UT, así, entre más procesos de tratamiento existan previamente más complica el diseño la adición de otro; además de esto, la adición de cada proceso de tratamiento implica también un nuevo divisor y términos bilineales asociados a este que generan no convexidades.

Respecto a la función objetivo del modelo, ésta fue formulada de manera general para minimizar CTA, sin embargo en la mayoría de los problemas abordados se buscó minimizar flujo total tratado, pues es lo más común en la literatura y en la mayoría de los problemas de referencia no se proporcionan datos económicos, a pesar de esto, es importante tener en cuenta que minimizando el flujo tratado no siempre se minimiza el costo (por ejemplo, ver Hidalgo-Muñoz, 2016). Por otro lado, la implementación de una función de costos no lineal también introduce no convexidades que hacen el problema más difícil de resolver y dichos casos podrían beneficiarse especialmente de la técnica de multi-arranque utilizada en este trabajo, como en el caso del Problema 5.7.

Con respecto a la metodología aplicada, si bien resultó ser muy eficiente, podría modificarse para realizar una exploración más adecuada de la región factible, beneficiándose de la información obtenida en iteraciones pasadas. Un aspecto evidente es que al implementar cada arranque de forma completamente aleatoria pueden visitarse y explorarse puntos que ya se exploraron con anterioridad, o bien, puntos muy cercanos entre sí, conduciendo a óptimos locales ya descubiertos (Shoen, 1990) y, en teoría esto podría pasar cientos de veces, consumiendo recursos computacionales inútilmente; para evitar esta situación puede llevarse un registro de cada punto visitado y evitar que este y otros puntos cercanos sean utilizados más de una vez como punto de arranque en la fase local. Esta u otras modificaciones podrían explorarse para mejorar la metodología.

Como se menciona, el número de iteraciones del algoritmo se fijó en 1000 a manera de prueba para todos los problemas, sin embargo se observó que la cantidad de iteraciones requeridas para obtener las mejores soluciones a cada uno de los problemas abordados es considerablemente menor, por lo que este valor podría ajustarse para reducir el tiempo de cómputo al aplicar el algoritmo a otros problemas dependiendo de su tamaño.



Por otro lado, los problemas de síntesis de sistemas de tratamiento distribuido son relativamente sencillos en comparación con el problema de optimizar simultáneamente el uso eficiente de agua y la red de tratamiento de efluentes, conocido como “red de agua total”, y como han señalado algunos autores como Takama y col. (1980) y Bagajewicz (2000), abordar el problema de esta manera puede resultar en mayores beneficios económicos y ambientales como el reuso del agua de proceso y la disminución del volumen de efluentes generado. De acuerdo a los resultados obtenidos en este trabajo, la metodología tiene potencial para abordar este tipo de problemas.

Otro aspecto a considerar es que los problemas abordados aquí han sido problemas académicos. Si bien las metodologías desarrolladas a nivel académico para estos problemas pueden aplicarse, y se han aplicado a la solución de problemas reales de la industria (ver por ejemplo Galán y Grossmann, 2011; Statyukha y col., 2008) y son potencialmente muy útiles, a la hora de aplicarse a estos casos deben considerarse otros factores que no fueron tomados en cuenta en este trabajo para generar el mejor diseño, como por ejemplo los costos de disposición de residuos, como se ve afectada la dinámica del sistema por las corrientes de reciclaje, que tan práctico resulta en realidad implementar corrientes con poco flujo, etc.; algunos de estos aspectos se han tomado en cuenta en los trabajos mencionados y en el trabajo de Li y col. (2015), por ejemplo. Según la información que se tenga disponible pueden incluirse en el modelo de optimización restricciones y/o términos en la función objetivo que consideren estos aspectos y deben evaluarse cuidadosamente en cada caso.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abadie, J., Carpentier, J. (1969). Generalization of the Wolfe reduced gradient method for nonlinear constraints. *Optimization* ( ed. R. Fletcher), 37-49.
- Ahmetovic, E., Ibric, N., Kravanja, Z. (2014). Optimal design of heat integrated water-using and wastewater treatment networks. *Applied Energy* 135, 791-808.
- Alva-Argáez, A., Kokosis, A. (1998). Wastewater minimization of industrial systems using an integrated approach. *Computers and Chemical Engineering* 22(Suppl), S741-S744.
- Bagajewicz, M. (2000). A review of recent design procedures for water networks in refineries and process plants. *Computers and Chemical Engineering* 24, 2093-2113.
- Bazaraa, M.S., Sherali, H.D., Shetty, C.M. (2006). *Nonlinear Programming. Theory and Algorithms*, 3a Edición. Ed. Wiley & Sons.
- Box, M.J. (1960). A new method of constrained optimization and a comparison with other methods. *The Computer Journal* 8, 1, 42-52.
- Castro, P.M., Matos, H.A., Novais, A.Q. (2007). An efficient heuristic procedure for the optimal design of wastewater treatment systems. *Resources Conservation and Recycling* 50, 158-185.
- Castro, P.M., Teles, J.P., Novais, A.Q. (2009). Linear program based algorithm for the optimal design of wastewater treatment systems. *Clean Technology. Environmental Policy* 11, 83-93.
- Chong, E. K. P., Zak, S. H. (2001). *An introduction to optimization*. 2a Edición. Ed. Wiley & Sons.
- Edgar, T.F., Himmelblau, D.M., Ladson, L.S. (1991). *Optimization of chemical processes*. 2a. Edición. Ed. McGrawHill.
- Feng, X., Chu, K.H. (2004). Cost optimization of industrial wastewater reuse systems. *Process Safety and Environmental Protection* 82, 3, 249-255.
- Freitas, I.S.F., Costa, C.A.V., Boaventura, A.R. (2000). Conceptual design of industrial wastewater treatment processes. *Computers and Chemical Engineering* 24, 1725-1730.
- Frontlinesolvers (2017). <https://www.solver.com/convex-optimization>
- GAMS Development Corporation (2001). GAMS-The solver manuals.
- Galán, B., Grossmann, I. E. (1999) Optimization strategies for the design and synthesis of distributed wastewater treatment networks. *Computers and Chemical Engineering Supplement* 23, S161-S164.
- Galán B., Grossmann, I.E. (1998). Optimal design of distributed wastewater treatment networks. *Industrial Engineering and Chemical Research* 37, 4036-4048.
- Galán, B., Grossmann, I.E. (2011). Optimal design of real world industrial wastewater treatment networks. *Computer Aided Chemical Engineering* 29, 1251-1255.
- Hernández-Suárez, R. (2004). Optimización y síntesis de redes de agua asociadas a plantas de proceso, *Tesis de doctorado en ciencias en ingeniería química*. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.

Hernández-Suárez, R., Castellanos-Fernández, J., Zamora, J.M. (2004). Superstructure Decomposition and Parametric optimization approach for the synthesis of distributed wastewater treatment networks. *Industrial Engineering and Chemical Research* 43, 2175-2191.

Hernández-Suárez, R., Zamora-Mata, J.M., Murrieta-Guevara, F., Lugo-Leyte, R. (2008). Análisis y reconfiguración óptima de líneas de efluente a una unidad de tratamiento multicontaminante. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 7, 2, 151-162.

Hidalgo-Muñoz, M. G. (2016). Diseño óptimo de sistemas de tratamiento sono-fenton para la degradación de paracetamol en efluentes hospitalarios, *Tesis de maestría en Ingeniería de Procesos*. Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco.

Integrated pollution prevention and control reference document on available techniques in common wastewater and waste gas treatment/management systems in the chemical sector, European Commission (2009). BREF document.

International Water Association Publishing (2017). <https://www.iwapublishing.com/news/industrial-wastewater-treatment>

Jezowski, J. (2010). Review of water network design methods with literature annotations. *Industrial Engineering and Chemical Research* 49, 4475-4516.

Jezowski, J., Bochenek, R., Ziomek, G. (2005). Random search optimization approach for highly multi-modal non-linear problems. *Advances on Engineering Software* 36, 504-517.

Kim, J., Kim, J., Kim, J., Yoo, Ch., Moon, I. (2009). A simultaneous optimization approach for the design of wastewater and heat exchange networks based on cost estimation. *Journal of Cleaner Production* 17, 162-171.

Kuo, W.-C. J., Smith, R. (1997). Effluent treatment system design. *Chemical Engineering Science* 52, 4273-2290.

Li, A.-H., Yang, Z.-H., Liu, Z.-Y. (2015). A numerical-based method for the design of distributed wastewater treatment systems with multiple contaminants. *AIChE Journal* 61, 3223-3231.

Li, A.-H., Zhang, J., Liu, Z.-Y. (2016). Design of distributed wastewater treatment networks of multiple contaminants with maximum inlet concentration constraints. *Journal of Cleaner Production* 118, 170-178.

Liu, Z.-H., Shi, J., Liu, Z.-Y. (2013). Design of distributed wastewater treatment systems with multiple contaminants. *Chemical Engineering Journal* 228, 381-391.

Linnhoff, B., Hindmarch, E. (1983). The pinch design method for heat exchanger networks. *Chemical Engineering Science* 38, 745-763.

Martín-Sistac, C., Graells, M. (2005). A robust hybrid search technique for solving distributed wastewater treatment systems. *Computer Aided Chemical Engineering* 20, 949-954.

McLaughlin, L.A., McLaughlin, H.J., Groff, K.A. (1992). Develop an effective wastewater treatment strategy. *Chemical Engineering Progress* 88, 9, 34-42.

Metcalf and Eddy Inc, (1991). *Wastewater Engineering: treatment, disposal and reuse*, 3a edición. Ed.Mc GrawHill.

- Nelder, J.A., Mead, TR. (1965). A simplex method for function minimization. *The Computer Journal* 7, 308-313.
- Núñez-Serna, R.I., Zamora, J.M. (2016). NLP model and stochastic multi-start optimization approach for heat exchanger networks. *Applied Thermal Engineering* 94, 458-471.
- Poplewski, G., Jezowski, J. (2007). A simultaneous approach for designing wastewater treatment network. *Chemical Engineering Transactions* 12, 321-326.
- Putra, Z.A., Amminudin, K.A. (2008). Two-step optimization approach for design of a total water system. *Industrial Engineering and Chemistry Research* 47 (16), 6045-6057.
- Ranade, V.V., Bhandari, V.M. (2014). *Industrial Wastewater Treatment, Recycling and Reuse*, 1a Edición, Butterworth-Heinemann.
- Rockafellar, R. T. (1993). Lagrange multipliers and optimality. *SIAM review*, 35,2, 183-238.
- Sahu, G.P., Garg, A., Majazi, T., Bandyopadhyay, S. (2013). Optimum design of wastewater treatment network. *Industrial Engineering and Chemistry Research* 52, 5161-5171.
- Shi, J., Liu, Z.-Y. (2011). A simple method for design of distributed wastewater treatment systems with multiple contaminants. *AIChE Journal* 57, 3226-3232.
- Shoen, F. (1991). Stochastic techniques for global optimization. A survey of recent advances. *Journal of Global Optimization*. 1, 207-228.
- Soo, S. S. T., Toh, E. L., Yap, K. K. K., Ng, D. K.S., Foo, D.C.Y. (2013). Synthesis of distributed wastewater treatment networks for one- and two- contaminant systems. *Chemical Engineering Research and Design* 91, 106-119.
- Spellman, F. R. (2013). *Handbook of Water and Wastewater Treatment Plant Operations*, 3a Edición, CRC Press.
- Spendley, W., Hex, G.R., Himsforth, F.R. (1962) Sequential application of simplex designs in optimization and evolutionary operation. *Technometrics* 4, 441-461.
- Statyukha, G., Kvitka, O., Dzhygyrey, I., Jezowski, J. (2008). A simple sequential approach for designing industrial wastewater treatment networks. *Journal of Cleaner Production* 16, 215-224.
- Sueviriyapan, N.; Suriyapraphadilok, U; Siemanond, K.; Quaglia, A.; Gani, R. (2016). Industrial wastewater treatment networks based on recycling and rerouting strategies for retrofit design schemes. *Journal of Cleaner Production* 111, 231-252.
- Takama, N., Kuriyama, T., Shiroko, K., Umeda, T. (1980). Optimal water allocation in a petroleum refinery. *Computers and Chemical Engineering* 4, 251-258.
- Teles, J.P., Castro, P.M., Matos, H.A. (2011). Multi-parametric disaggregation technique for global optimization of polynomial programming problems. *Journal of Global Optimization* 55, 227-251.
- Teles, J.P., Castro, P.M., Matos, H.A. (2012). Global optimization of water networks using multiparametric disaggregation *Computers and Chemical Engineering* 40, 132-147.

Ting, L., Castro, P.M., Zhimin, L. (2016). Models and relaxations for the wastewater treatment design problem. *Chemical Engineering Research and Design* 106, 191-204.

Tsai, M.-J., Chang, C.-T. (2001). Water usage and treatment network design using genetic algorithms. *Industrial Engineering and Chemistry Research* 40, 4874-4888.

Wang, Y.P., Smith, R. (1994). Design of Distributed Effluent Treatment Systems. *Chemical Engineering Science* 49, 3127-3145.

Zamora-Mata, J.M., Hernández-Suárez, R., Castellanos-Fernández, J. (2004). Modelo de programación lineal para asistir en el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 3, 121-134.

Zamora, J.M., Grossmann, I.E. (1998). Continuous global optimization of structured process system models. *Computers and Chemical Engineering* 22, 1749-1770.